TÜBİTAK 3501
ARAŞTIRMA PROJESİ
SONUÇ RAPORU

TÜBİTAK

Kauçuk türü Malzemeler için İnelastik Yırtılma ve Kavitasyon modeli Geliştirilmesi

Program Kodu: 3501

Proje No: 315M140

Proje Yürütücüsü:
Doç. Dr. Hüsnü DAL
Orta Doğu Teknik Üniversitesi
Makina Mühendisliği Bölümü

Bursiyerler:
Kemal Açıkgöz, M.Sc.
Ayşe Usta, M.Sc.
Imran Ahmed, M.Sc.

OCAK 2019
ANKARA

ÖNSÖZ

Bu proje kapsamında kauçuk türü malzemelerin düşük ve yüksek hızlarda yırtılması, çatlak başlangıcı ve ilerlemesi irdelenmiştir. Ayrıca kauçuk türü malzemelerin hidrostatik basınç ve çekme altında gösterdiği kavitasyon türü kararsızlık, kavitasyon oluşumu ve termodinamik açıdan tersinemez bir şekilde büyümesi çok ölçekli bir bünye modeli geliştirilerek açıklanmıştır.

Bu proje TUBİTAK tarafından sağlanan 3501 – Ulusal Genç Araştırmacı Kariyer Geliştirme Programı kapsamında gerçekleştirilmiştir. Proje yürütücüsü, ülkesine dönerek öğretim görevlisi olarak başlattığı akademik kariyeri için gerekli laboratuvarı ve proje ekibini bu değerli destek ile oluşturmuştur. Proje kapsamında TUBİTAK ve ODTÜ Araştırmalar Koordinatörlüğü'nün sağladığı destek sayesinde ODTÜ Makine Mühendisliği Bölümü içinde Hesaplamalı Mikromekanik Laboratuvarı kurulmuş ve 4 lisansüstü öğrencinin kullanabileceği bir laboratuvar alt yapısı kurulmuştur. Proje ekibi olarak, *Türkiye Bilimsel ve Teknik Araştırma Kurumu*'na sağladığı destek nedeniyle **teşekkür** ederiz.

Proje ekibi proje kapsamında SCI indeksli 1 adet uluslararası bilimsel makale, 2 adet uluslararası konferans bildirisi sunmuştur. ECCM-6 Avrupa Hesaplamalı Mekanik Kongresinde 'Kompleks Malzemelerde Yırtılma için Faz Alanı Yöntemleri' başlıklı bir mini-sempozyum düzenlenmiştir. Proje sonuçlarından en az 2 adet SCI indeksli bilimsel makale yazım aşamasındadır. Bu desteği, ülkemizin bilim dünyasında hak ettiği noktalara gelebilmesi ve Türk bilim insanlarının uluslararası düzeyde rekabet edebilmelerine olanak sağlaması açısından çok anlamlı buluyoruz.

Bu projeyi, proje kapsamında yayımlanan ilk makalede ortak yazar olan, kariyer projemin başlatılması öncesinde ilk fikirlerimi paylaştığım, kavitasyon başlangıcı konusunda ilk amatör sonuçlarımı benimle tartışan ve yorumlayan, faz alanı yaygın çatlak modelini literatüre kazandıran ve 14 Ağustos 2016 tarihinde aramızdan ayrılan değerli hocam, büyük mekanikçi Prof. Dr.-Ing. Christian Miehe'ye adıyorum.

30.01.2019

Doç. Dr. Hüsnü Dal

İçindekiler

Proje Başlığı ve Proje Özeti ... 0
1. Giriş ... 1
1.1 Projenin Kapsamı ... 1
2. Literatür Özeti ... 5
2.1 Kauçuk türü malzemelerin hiperelastik davranışı ... 5
2.2 Kauçuk türü malzemelerin elastik ve viskoelastik yırtılma davranışı ... 5
2.3 Kauçuk türü malzemelerde kavitasyon oluşumu ve kavitasyon büyümesi ... 7
3. Gereç ve Yöntem ... 8
3.1 Kauçuğun Elastik Yırtılması Konusunda Gerçekleştirilen Çalışmalar ... 8
3.1.1 Elastik Yırtılma için Kuramsal Çalışmaların Özeti ... 8
3.1.2 Elastik Yırtılma için Sayısal Çalışmaların Özeti ... 11
3.2 ViskoelastikYırtılma için Kuramsal Çalışmalar ... 14
3.2.1 Genelleştirilmiş sıkıştırılabilir neo-Hooke model ve 8-zincir modeli ... 14
3.2.2 Hacimsel etkileri içeren yeni sonlu viskoelastik model ... 15
3.2.3 Genelleştirilmiş sıkıştırılabilir neo-Hooke ve 8-zincir modeli ... 16
3.2.4 Yeni evrilme eşitliği ... 17
3.2.5 Yeni Yırtılma Kriteri ... 18
3.2.6 Parametre Belirleme ve Farklı Yükleme Hızları Altında Çatlak Oluşumu ... 18
3.3 Kavitasyon oluşumu ve kavitasyon büyümesi için çok-ölçekli bünye denklemi ... 21
3.3.1 Kuramsal Çalışmaların Özeti ... 21
3.3.2 Sayısal Çalışmaların Özeti ... 26
4. Bulgular ve Sonuç ... 29
4.1 Bulgular ... 29
4.2 Sonuç/Tartışma ... 30
4.3 Proje Çıktıları ... 30
Kaynakça ... 31
Ek 1: FEAP 8.3 için Kullanıcı Tanımlı Eleman ve Malzeme Alt Programları ... 34

Şekiller Listesi

Şekil 1. Li, Mayau & Lagarrigue [37] calismasindan alinan dolgulu dogal kaucuk numunelerinin sirasiyla, tek eksenli cekme, esikieksenli cekme ve poker-cipi (krep) cekme deneylerinden elde edilen gerilme-deformasyon egrileri 3
Şekil 2. Cristiano ve ark. [12] calismasindan alinan kavitasyon başlangıcı ve büyümesini gösteren deneysel çalışma ve yük-deplasman eğrisinin farklı aşamalarının fotoğraflarla gösterimi 4
Şekil 3. (a) Kauçuk türü malzemelerin gerilim-uzama eğrisi histerezis davranış sergilemektedir. (b) Kauçuk birincil elastik ve viskositeye neden olan ikincil ağın denge durumundaki şematik gösterimi, (c) kauçuk ağın yükleme altında deforme olmuş birincil ve ikincil ağların anlık şematik gösterimi. (Çizim: Schanzel, Dal, Miehe [57], ve Schanzel [58])..... 6
Şekil 4. Neo-Hooke modelinin Treloar deney verisine (a) tek eksenli çekme (b) çift eksenli çekme (c) saf kesme deformasyonları altında birlikte elde edilen en uygun (best fit) eğrileri..... 9
Şekil 5. Mikro-küre modelinin [46] Treloar deney verisine (a) tek eksenli çekme (b) çift eksenli çekme (c) saf kesme deformasyonları altında birlikte elde edilen en uygun (best fit) eğrileri..... 9
Şekil 6. Serbest ve kısıtlı zincir kinematik olarak boyuna uzama $\boldsymbol{\lambda}$ ve enine alan kısalması $\boldsymbol{\upsilon}$ ile ifade edilmektedir. Bu iki kinematik parametre serbest enerji fonksiyonunun argümanlarını oluşturmaktadır. 10
Şekil 7. Mikro-küre modeli tüp kısmının şematik gösterimi ve enerji fonksiyonu ve gerilim ifadelerinin tablosal gösterimi: Mikro-küre modelinin tüp-kısıt komponentinin serbest enerji fonksiyonunun enine alan kısalması $\boldsymbol{\upsilon}$ parametresine bağlı olarak modellenir. Çizim Miehe et al.[46]'dan alınmıştır. 11
Şekil 8. Kauçuk türü malzemelerde düzlemsel bir numunede çatlak ucunun farklı yükleme düzeylerinde görünümü. Kaynak: http://chaos.utexas.edu/people/faculty/michael-p-marder/fracture-of-rubber 12
Şekil 9. Kauçuk türü malzemelerde düzlemsel bir numunede çatlak ucunun çatlak ilerleme anında anlık görüntüsünün ağsız ve sonlu elemanlar ağı ile görüntülenmesi. Hasar parametresinin d>0.99 oldugu bölgeler karatılarak çatlak görüntülenmiştir..... 12
Şekil 10. Kuruş şeklindeki çatlak içeren iki boyutlu düzlemsel test numunesinin geometrik şekli ve yükleme ve sınır değer koşulları. Numune alt yüzeyden sabitlenip üst yüzeyde deplasman uygulanarak yüklenmektedir..... 12
Şekil 11. Şekil 10'da verilen numunenede çatlak başlangıcı anında (a): 1. Piola-Kirchhoff gerilim tensorünün düşey komponenti (b) faz alanı hasar parametresinin çatlak başlama anında dağılımı. ... 13
Şekil 12. Şekil 10'da verilen numunenin 5000, 15000 ve 45000 elemanla yapılan benzetimlerin yük deplasman eğrilerin (a) l=0.01mm ve (b) l=0.02mm ölçek boyutu parametresine bağlı olarak grafik gösterimi. 13
Şekil 13: Yırtılma enerjisinin çatlak ilerleme hızına bağlı olması. Çizim SBR kauçuğu için elde edilmiştir, bknz Persson ve ark. [67]. 14
Şekil 14: Önerilen standart viskoelastik katı reolojisi (Maxwell gösterimi) 15
Şekil 15:. Lineer logaritmik ve logaritmik+kuadratik formülasyonla elde edilmiş Kirchhoff ve Cauchy gerilimlerinin davranışı..... 15
Şekil 16: Önerilen sonlu viskoelastisite modelinin cam geçişkenlik sıcaklığı üzerinde kauçuk davranışı sergileyen epoksi malzemenin krip-sünme deney sonuçları ile doğrulanması. Deney sonuçları Maryland Üniversitesi'nden Prof. Dr. Bongtae Han tarafından temin edilmiştir. 18
Şekil 17: Kriter 1: Düşük ve yüksek yükleme hızlarında tek eksenli çekme deneyi esnasında çatlak noktasında oluşan (a) Kuvvet-zaman (b) Kuvvet-deplasman eğrisi..... 19
Şekil 18 Kriter 2: Düşük ve yüksek yükleme hızlarında tek eksenli çekme deneyi esnasında çatlak noktasında oluşan (a) Kuvvet-zaman (b) Kuvvet-deplasman eğrisi..... 19
Şekil 19: Kriter 2: v=0.001mm/s (sol) ve v=10mm/s (sağ) hızlarda çekilen numunenin iki farklı hızda gösterdiği çatlak ilerlemesi 20
Şekil 20: Viskoelastik çatlak ilerlemesi: V-tipi çatlakta hasar parametresinin çatlak oluşumu ve ilerleme başlangıcındaki görünümü 20
Şekil 21. Makro-, mezo-, ve mikro-ölçeklerde ideal kauçuk türü yapıların görünümü..... 21
Şekil 22. İçerisinde kavite bulunan mezo yapının referans ve anlık konfigürasyonları. Kavitenin yarıçapı $\boldsymbol{r0}$'dur. Burada $\boldsymbol{\varphi t}: \mathfrak{B}\boldsymbol{0} \rightarrow \mathfrak{B}$ makro ölçekli deformasyon dönüşümüdür. $\mathfrak{B}\boldsymbol{0}$ ve $\mathfrak{B}$ hacmin referans ve anlık isimlendirmeleridir. Karşılık olarak, $\boldsymbol{\partial}\mathfrak{B}\boldsymbol{0}$ ve $\boldsymbol{\partial}\mathfrak{B}$ referans ve anlık yüzey isimlendirmeleridir..... 22
Şekil 23. $\boldsymbol{r0}$ yarıçaplı küresel mezo-yapı: $\mathbf{r0} \leq \mathbf{r} \leq \mathbf{1}$, $\mathbf{0} \leq \boldsymbol{\vartheta} \leq \boldsymbol{\pi}$ ve $\mathbf{0} \leq \boldsymbol{\phi} \leq \mathbf{2}\boldsymbol{\pi}$ sağlandığı durumda Lagrange koordinat vektörü $\boldsymbol{X}$, Küresel koordinatlarla parametrik hale getirilebilir (r, ϑ, ϕ)... 23
Şekil 24. Kürenin ilk oktantında, entegrasyon ızgarasının radyal yönde ve küre yüzeyinin üzerinde tasvir edilmiş görünümü 25
Şekil 25: Li ve ark. [37] tarafından gerçekleştirilen tek eksenli çekme, çift eksenli eş-çekme ve poker-çipi tarzı numunelerle tek eksenli hacimsel uzama deneyleri ve hiperelastik Yeoh modeli ile elde edilen sonuçlar. 26
Şekil 26: Li ve ark. [37] tarafından gerçekleştirilen tek eksenli çekme, çift eksenli eş-çekme ve poker-çipi tarzı numunelerle tek eksenli hacimsel uzama deneyleri ve geliştirilen çok ölçekli mikro-küre hasar modeli ile elde edilen sonuçlar. 26

Şekil 27: Silikon yapıştırıcı için 3 boyutlu deney numunesi 27
Şekil 28. (a) İki metal plaka arası silikon yapıştırıcı halka: Alt silindirik yüzeyden tutulan ve üst silindirik yüzeyden çekilen silikon yapıştırıcıda (b) u=0mm, (c) u=0.1mm, (d) u=0.2mm, (e) u=0.35mm için üst metal plakanın hemen altında gerçekleşen cavitasyon yarıçapı değişimi. Lejant normalize edilmiş kavite yarıçapını göstermektedir. 28
Şekil 29: Bosch GmbH, Renningen tarafından elde edilen sonuçlar (sol) ile geliştirilen model (sağ) ile yapılan benzetim sonuçlarının karşılaştırılması 28
Şekil 30. Cristiano ve ark. [12] calismasinda kullanılan geometri üzerinde yapılan kavitasyon benzetimi: (a) Başlangıç konfigürasyonu, (b) merkezde kavitasyon başlangıcına denk gelen deforme olmuş konfigürasyon. 29

Tablolar Listesi

Tablo 1. Mikro-küre modelinin serbest enerji fonksiyonu serbest zincir davranışı ile alan kısıtının enerjetik katkılarının ayrı ayrı ele alındığı iki komponentin toplamı ile ifade edilir. Serbest zincir uzaması her bir zincir $\boldsymbol{\lambda}$ uzamalarının p-kök ortalaması ile tek bir ortalama makroskopik uzama $\boldsymbol{\lambda}$ değerinin elde edilmesi ve bu değerin Langevin serbest enerji fonksiyonuna entegre edilmesiyle elde edilir. 11
Tablo 2. Mikro, mezo ve makro niteliklerin tanımları 23
Tablo 3. Kuadratürde kullanılmak üzere yarım küre için zincirlerin nokta ve ağırlık değerleri 25
Tablo 4. Radyal yönde Gauss tümlevi için kullanılan integrasyon noktaları: $\boldsymbol{xm} = (\mathbf{1} + \boldsymbol{r0})/\mathbf{2} \quad \boldsymbol{l} = \mathbf{1} - \boldsymbol{r0}$. $\boldsymbol{r0}$ birim küre içinde kavitenin yarıçapını ifade etmektedir..... 25

Proje Başlığı ve Proje Özeti

Proje Başlığı : Kauçuk türü malzemeler için inelastik yırtılma ve kavitasyon modeli geliştirilmesi

Sonuç Raporu Özeti

Bu proje kapsamında kauçuk türü malzemeler için (i) farklı bünye modelleri karşılaştırılmış, (ii) viskoelastik hacimsel ve eş-hacimli deformasyonlar için akma-krip davranışı için özgün bir evrim denklemi geliştirilmiş, (iii) elastik ve viskoleastik deformasyonlar altında faz alanı çatlak modeli geliştirilmiştir ve (iv) kavitasyon başlangıcı ve büyümesi çok ölçekli bir bünye modeli ile modellenmiştir. Yapılan karşılaştırmalı çalışma mikro-küre modelinin kauçuğu en yüksek hassasiyetle tanımladığı gözlemlenmiş ve bu nedenle faz alanı yaygın çatlak modeli geliştirilirken tercih edilmiştir. Ayrıca kauçuk türü malzemelerde kavitasyon fenomeni çok ölçekli mikro-küre yöntemi ile modellenmiştir. Malzemenin viskoz davranışı için sekiz-zincir kuramı kullanılmıştır. Bu tercih, viskoz davranışın daha az malzeme parametresiyle modellenebilmesi nedeniyle daha çok pragmatik sebeplerle yapılmıştır. Geliştirilen bünye ve yırtılma modelleri sayısal olarak doğrusal olmayan, akuple sonlu elemanlar yöntemine dayalı geliştirilen eleman ve malzeme altprogramları yardımıyla analiz edilmiştir.

Birinci aşamada, kauçuğun kopması, gradyan hasar mekaniği kuramı sayılabilecek olan yaygın alan çatlama kuramıyla modellenmiştir. Bu kuram malzememin intak durumdan kırılma durumuna geçişini faz dönüşümü olarak ele almaktadır. Birinci faz malzemenin intak durumunu, ikinci faz malzemenin taşıma gücünü tamamen kaybettiği yırtılma yüzeyini ifade eder. Faz alanı yaygın alan çatlama kuramının kauçuk için uyarlanması için deneylerle tespit edilmiş yırtılma zarfları ile uyumlu kırılma/kopma kriteri önerilmiş ve yaygın alan çatlama kuramının içine çatlak büyüme fonksiyonu şeklinde yerleştirilmiştir. Malzemenin yırtılma zarfı eşik enerji kriteri ile modellenmiştir. **İkinci aşamada** kauçuk türü malzemeler için viskoelastik yırtılma kuramı geliştirilmiştir. Bu kapsamda serbest enerji fonksiyonunun elastik ve viskoz katkılarının çatlak yüzeyi oluşumuna katkıları birlikte ele alınmış ve çatlak etki bölgesinde viskoz deformasyonlardan kaynaklanan enerji sönümleme etkisi irdelenmiştir. Viskoz deformasyonların ele alındığı ve alınmadığı durumlar için çatlak profillerinin karşılaştırması yapılmıştır. **Üçüncü aşamada**, kauçuk türü malzemelerin hidrostatik yükler altında gösterdiği kavitasyon türü kararsızlıklar ele alınmıştır. Çok ölçekli, temsili küresel boşluk içeren küresel bir temsili hacim elemanı öncelikle sayısal homojenizasyon yöntemleri ile modellenmiş ve porozite etkisini içeren sıkıştırılabilir kauçuk bünye denklemi elde edilmiştir. Daha sonra, bu model sürekli ortamlar mekaniği ve hasar mekaniği ilkelerine bağlı kavitasyon başlangıcı ve büyümesi kriteri geliştirilerek modellenmiştir. Projenin üç aşamasında geliştirilen kuramlar için, sonlu elemanlar yöntemi (SEY) kullanılarak sayısal eleman ve malzeme algoritmaları geliştirilmiştir ve gerçekleştirilen benzetimler yardımıyla doğrulama çalışmaları yürütülmştür. Bu kapsamda geliştirilen sayısal algoritmalar, problem-spesifik çoklu-fizik çözücü açık kaynak kodlu sonlu elemanlar programlarına entegre edimiş ve doğrulama çalışmaları yürütülmüştür. Geliştirilen sonlu eleman yöntemine dayalı algoritmalar yardımıyla faz alanı yaygın çatlama modeli ve kavitasyon başlangıcı ve ilerlemesini ele alan çok ölçekli mikro küre bünye modeli ile ik ve üç boyutlu başlangıç sınır değer problemleri çözülmüş ve proje kapsamında geliştirilen kuramların kabiliyetleri gösterilmiştir.

Proje kapsamında geliştirilen kuramsal ve sayısal yöntemlerin, kauçuk türü malzemelerin tasarımında, özellikle ömür tayini çalışmalarına önemli katkılar sunması beklenmektedir.

Anahtar Kelimeler: Hesaplamalı katı cisimler mekaniği, hasar mekaniği, polimer mekaniği, sonlu elemanlar yöntemi, polimer mekaniği, faz alanı modeli, sonlu viskoelastisite, kavitasyon

1. Giriş

1.1 Projenin Kapsamı

Bu proje 3 iş paketinden oluşmaktadır. İlk iki paket kauçuk türü malzemelerde çatlak başlangıcı ve ilerlemesi Griffith yaklaşımından farklı olarak keskin bir çatlak topolojisi yerine yaygın çatlak yaklaşımı sergileyen faz alanı çatlak kriteri kullanılacaktır. 3. ana iş paketi ise kauçuk türü malzemelerde hidrostatik eksi basınç gerilimler altında oluşan kavitasyon olgusu modellenecektir. İlk iki bölümde kauçuk türü malzemelere uygulayacağımız faz alanı çatlak yaklaşımı keskin çatlak yaklaşımlarına oranla aşağıda belirtilen avantajlara sahiptir: (i) Çatlak başlangıcı için varolan bir çatlağa ihtiyaç duymazlar. Bu nedenle eşik çatlak enerjisi veya gerilimine ulaşıldığı anda çatlak başlar. Griffith yaklaşımı çatlağın başlaması ile ilgili mevcut bir çatlağa ihtiyaç duyar. Çoğu mühendislik probleminde böyle bir çatlak tasarımda local olarak yaratılmak zorundadır. Bu durumda dahi sisteme konulan sahte çatlağın doğrultusunun ne olacağı ayrı bir problem teşkil eder. (ii) Faz alanı yaklaşımı keskin bir çatlak analizinde çatlağın başlangıç anını ve koşullarını tahmin etse dahi çatlağın ilerlemesi ile ilgili her zaman doğru bilgiyi vermez. Faz alanı yaklaşımı system enerjisinin minimize / çatlak ilerlemesi anında ise enerji sönümleme oranını maksimize ederek (termodinamiğin ikinci kuramına uyumlu bir şekilde) çatlak doğrultusunu akuple denklem sistemi ile doğal olarak yakalar bakınız referans [68,69]. (iii) Sonlu Elemanlar Yöntemine entegrasyonu XFEM veya koheziv bölge elemanlara (cohesive zone elements) oranla çok daha basittir. XFEM kompkes zengliştirme fonksiyonları ile çatlak nedeniyle oluşan süreksizlikleri ele alırken koheziv bölge elemanı çatlağın lokasyon ve doğrultu bilgilerinin biliniyor olması varsayımına dayalı olarak kullanılan bir yöntemdir. Koheziv bölge elemanları bu nedenle çatlak doğrultusunun belirlenmesi için J-integral veya malzeme kuvvetlerinin (material forces) hesaplanmasını gerektirir.Bu yöntemler genelde gevrek elastik yırtılma kuramlarında sayısal/algoritmik olarak pahalı olmasına rağmen kullanılabilirken inelastik ve anizotropik ortamlarda çatlak başlatmak ve ilerletmek için çok da uygun olmamaktadır. Spesfik olarakak koheziv bölge elemanları birbirine yapıştırılmış katmanların delaminasyon-ayrışma benzetimleri için gayet uygun bir yöntemdir. Termo-mekanik akuple problemlerinin çözümünde elde edilen denklem sistemlerine benzer bir Euler-Lagrange denklem sistemi elde edildiğinden standard sonlu eleman çözücülerine eklemlenmesi gayet kolaydır. Buna karşın faz alanı çatlak modelinin bazı devantajları vardır. Bunlar

- Yaygın çatlak parametresi olarak kullanılan ölçek uzunluğunun çatlak etrafında ağ yoğunluğunu control etmesi nedeniyle çatlak etrafında ağ yoğunluğunun yüksek olmasını gerektirmesi
- Çatlak hızının belirlenmesi sonrasında arttırımlı zaman aralığının her bir arttırımda birden fazla elemana nüfuz etmeyecek şekilde ayarlanması gerekliliği

benzetimlerin kaba bir ağ yoğunluğu ile başlanarak ağ yoğunluğun ve çatlak başlangıcı sonrası zaman arttırımının adaptif bir şekilde uyarlanmasını gerektirmektedir.
IP 1'de kauçuk türü malzemelerin yarı-durağan (quasi-static) yüklemeler altında ve hiperelastik malzeme davranışı altında çatlak başlangıcı, IP 2'de yükleme hızının ve viskoelastik etkilerin de göz önünde bulunduğu dinamik yükleme koşulları altında çatlak başlangıcı ve ilerlemesi konuları irdelenecektir. IP 3'te ise hidrostatik yüklemeler altında malzeme instabilitesi olarak kendini gösteren kavitasyon oluşumu ve büyümesi konusu 3-ölçekli bir mikro-küre kavitasyon modeli – hasar mekaniği kuramına bağlı bir bünye modeli olarak – modellenecektir. Bu bağlamda işlenecek il paketleri aşağıda verilmiştir:

IP 1: Kauçuk türü malzemeler için faz alanı yaygın çatlak modeli geliştirilmesi

Bu iş paketinde kısa bir literatür taraması sonrasında kauçuk türü malzemelerin yırtılması üzerine en gelişmiş teknikler kullanılarak elde edilen deneysel çalışmalar gözden geçirilerek çekme-gerilme ve yırtılma verileri elde edilecektir. Bu veriler ışığında sırasıyla aşağıdaki listelerde sıralanan çalışmalar gerçekleştirilecektir.

IP 1.1: *Kauçuk türü malzemelerin elastik yırtılma kuramı geliştirilmesi*

Düşük yükleme hızlarında, kauçuk türü malzemelerin hiperelastik davranış sergilemektedir. Viskoelastik etkinin ihmal edilebileceği yavaş yükleme hızları için kauçuğun yırtılması için faz alanı yaygın çatlak modeli kullanılarak lokal olmayan bir gradyan hasar teorisi geliştirilecektir. Bu kuramın seçilmesinin ana nedeni lokal hasar mekaniği teorilerin sonlu elemanlar yöntemi kullanıldığında ağ sıklığına bağlı olarak değişken, nesnel olmayan sonuçlar vermesidir. Kırılma mekaniği yöntemlerine tercih edilme nedeni ise kırılma mekaniğinin kırılma başlangıcı için

mevcut bir çatlağa ihtiyaç duyması ve çatlağın ilerlemesinin algoritmik olarak elde edilmesinin zorluklarıdır. XFEM tabanlı teoriler de malzemeden çok geometrik öğelere dayalı ol up daha çok gevrek ve izotropik malzemelerde iyi sonuçlar vermektedir. XFEM yöntemi çatlak ilerlemesini ortotropik, inelastik malzemelere uyarlamak ciddi zorluklar içermektedir. Bu iş paketinde çatlağın başlangıcını üç boyutlu deformasyonlarda fiziksel olarak deneysel sonuçlara en yakın şekilde elde eden bir yaklaşım üzerine çalışılacaktır. Bu aşamada çeşitli hasar oluşum kriterleri önerilerek deneylerle doğrulanacaktır. Elastik davranış için neoHooke modeli [61], mikro-küre [46, Miehe05] veya sekiz-zincir [2] modellerinden birisi seçilecektir. Bu modellerin tercih edilme nedeni fiziksel tabanlı olmalarıdır. Diğer yandan geliştirilecek çatlama modelinin genel anlamda herhangi bir hiperelastik modele uyarlanabilecek yapıda olmasına özen gösterilecektir.

IP 1.2: *Kauçuk türü malzemelerin viskoelastik yırtılma kuramı geliştirilmesi*

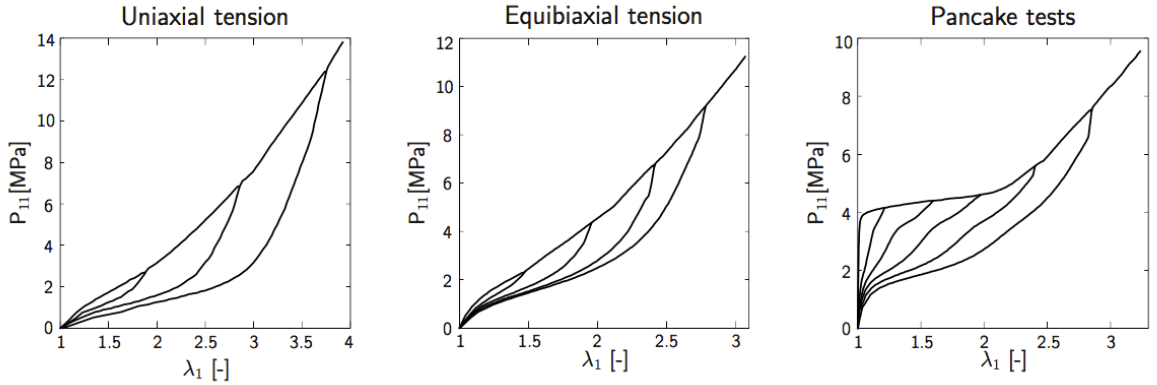
IP 1.1de geliştirilen kuram yalnızca yarı-statik (durağan) yükleme sınırlarında geçerli olup gerçekte elastomerlerin yırtılması dinamik bir süreç olup, yükleme koşulları değişken çatlak ilerleme hızlarına neden olmaktadır. Bir başka deyişle, birim çatlak alanı oluşturmak için kauçuktan oluşan bir yapının kaybetmesi gereken birim yüzey enerjisi çatlağın ilerleme hızının bir fonksiyonudur. Bu ilişki, çatlağın ilerlerken oluşturduğu yüzeye dik uzanan zincir sayısının sabit olması nedeniyle elastik kuramla açıklanamamaktadır. Halbuki viskoelastik malzeme denklemleri kauçuk ağın sabit bir ağ (elastik ağ) ve farklı miktarda ve boyda serbest zincirlerin (ikincil ağ/ağların) süperpoziyonu ile elde edilmektedir. Bu ikincil ağ içinde bulunan zincirler yavaş yükleme koşullarında yüzeyden sıyrılarak yırtılma enerjisinin düşük kalmasını sağlar. Yüksek hızlarda bu zincirlerin sürünerek ve Brown devinimi ile yırtılma yüzeyinden sıyrılacak zamanı bulamamaları nedeniyle koparlar bu da artan yükleme hızlarında artan yırtılma direnci şeklinde deneylerde gözlemlenen davranışı açıklar. Bu iş paketinde ikincil ağın (viskoelastik davranışa neden olan serbest zincirler) yükleme hızına bağlı olarak yırtılma enerjisini değiştirmesini açıklayan bir kuram geliştirilecektir. İlk olarak mevcut bir sonlu deformasyon viskoelastisite (finite viscoelasticity) modeli (mesela Bergström-Boyce modeli [Dal09], Reese & Govindjee [Reese98a, Reese98b], veya Miehe & Göktepe [Miehe05]) IP 1.1'de geliştirilen bünye denklemine eklenecektir. Elde edilen basit Maxwell tarzı reolojik yapı yardımıyla yırtılma kriterinin viskoelastik etkiyi göz önünde bulundurularak değiştirilmesi ile birlikte viskoelastik yırtılma kuramı tamamlanmış olacaktır. Geliştirilen modelin doğrulama çalışmaları yapıldıktan sonra algoritmik/sayısal modellemeye geçilecektir.

IP 2: Kavitasyon oluşumu ve kavitasyon büyümesi için çok-ölçekli bünye denklemi

Mevcut hiperelastik bünye denklemleri genelde sıkıştırılamaz kabul edilen kauçuğun *hidrostatik* yüklemeler altındaki davranışını ele almaz. Hidrostatik çekme gerilmelerinin belli bir eşik değerinin altında kaldığı durumlarda bu kabul hesaplamalarda ciddi bir hata unsuru oluşturmaz. Fakat geometrik nedenlerle yüklemede yüksek hidrostatik çekme gerilmesine maruz kalan malzeme çatlak yerine kavitasyon denen gözenekler oluşturur. Bu gözenekler artan yükler altında tersinemez bir şekilde buyur ve sonuç olarak sıkıştırılamaz davranış yerine sıkıştırılabilir mekanik davranış gözlenmeye baslar. Malzemenin kesme gerilmelerine, tek yönlü veya çift yönlü sekil değiştiren deformasyonlara maruz kalırken yırtılma seklinde bir başarısızlık gösterirken (failure) üç-eksenli eşit gerilmeler altında kavitasyon seklinde bir başarısızlık sergiler. Konvansiyonel modeller *hidrostatik+şekil değiştirme* deformasyonlarını içeren yüklemeler altında başarılı sonuçlar vermemektedir. Bunun yanı sıra kauçuk türü malzemelerin hidrostatik yükler altında sergilediği kabarcık oluşumu (cavity formation) ve bu kabarcıkların tersinemez büyümesini ele alan sınırlı sayıda kuram bulunmaktadır ve bu kuramlar kavitasyon fenomeni için genel bir yaklaşım sunmaktan çok uzaktır.

IP 2.1: *Sayısal homojenizasyon yöntemi ile sıkıştırılabilir kauçuk bünye denklemi geliştirilmesi*

Hou & Abeyaratne [29] kinematiği kullanılarak küresel boşluk içeren küresel temsili hacim elemanı sayısal homojenizasyon yöntemi ile boşluk ve sıkıştırılamaz kauçuktan oluşan kompozit kürenin davranışı elde edilecektir. Burada radyal ve yüzeysel yönlerde sırasıyla Gauss tümlevi ve Bazant & Oh [4] yaklaşımları kullanılacaktır. Numerik integrasyon sonucunda elde edilen davranış sayesinde doğrusal olmayan hiperelastik bir model ve belli bir porozite değerinin ek bir malzeme parametresi olarak ele alındığı bir kompozitin efektif sıkıştırılabilir davranışı elde edilecektir.



Şekil 1. Li, Mayau & Lagarrigue [37] calismasindan alinan dolgulu dogal kaucuk numunelerinin sirasiyla, tek eksenli cekme, esikieksenli cekme ve poker-cipi (krep) cekme deneylerinden elde edilen gerilme- deformasyon egrileri

IP 2.2: *Çok-ölçekli kavitasyon büyüme modeli geliştirilmesi*

IP 2.1de geliştirilen modelde porozite düzeyi (d=0 sıkıştırılamaz ve d=1 tamamen boşluk) hasar mekaniği kuramındaki hasar 'd' parametresi olarak ele alınacaktır. Bu durumda porozitenin ilk değeri sıfıra çok yakın olan bir kürenin davranışı sıkıştırılamaz hiperelastik malzemeye tekabül edecektir. Boşluk yüzeyindeki gerilmenin yırtılma eşik düzeyini aştığı durumlarda tersinemez bir şekilde porozitenin büyümesini ön gören fiziksel bir model geliştirilecektir. Bu kuram deneysel sonuçlarla doğrulanarak porozite büyüme kriteri en iyileştirilecektir. Sekil 5'te verilen ilk iki deney sonucu sıkıştırılamaz hiperelastik modellere Mullins-tarzı hasar teorisi göz önünde bulundurulduğunda rahatlıkla modellenebilirken, krep veya poker cipi denen deney numunelerine uygulanan çekme deformasyonları tamamen hacimsel değişime neden olduğundan sıkıştırılamaz hiperelastik kuramların etkisiz kaldığı gözlemlenmektedir. Geliştirilecek çok-ölçekli kavitasyon büyüme modeli **Şekil 1'**de görülen üçüncü eğrinin kritik esik gerilmesinden sonra kavitasyon nedeniyle gösterdiği keskin yumuşama modellenebilecektir.

IP 3: Faz alanı yaygın çatlak modeli ve kavitasyon için çoklu-fizik sonlu elemanlar yöntemi

IP 1 ve IP2'de geliştirilen teori çoklu-fizik problemlerinde kullanılan bağlı sonlu elemanlar yöntemi kullanılarak ayrık matematiksel ifadelere dönüştürülecektir. Ayrıştırma algoritmaları yardımıyla geliştirilen etkileşim problemi, mekanik hareket denkleminin ve çatlak oluşum ve ilerlemesini modelleyen kısmi diferansiyel denklemlerin ardışık olarak (one pass operator-splitting technique) çözülecektir. Burada Galerkin tarzı sonlu elemanlar metodu ve doğrusal şekil fonksiyonları kullanılacaktır. Galerkin yöntemi ile iki ve üç boyutlu deformasyonları kapsayacak şekilde sayısal alt-yazılımlar FORTRAN dilinde FEAP açık kaynak kod sonlu elmanlar yöntemi programına entegre edilecektir. Geliştirilen sonlu elemanlar yöntemi tabanlı algoritmaların doğrulama çalışmaları yapıldıktan sonra örnek başlangıç-sınır değer problemlerin çözümüne geçilecektir. Başlangıç-sınır değer problemleri gerçekçi prototip kauçuk yapıların farklı yükleme koşulları/hızları altında teorinin öngörüleri ve bunların yapısal düzeyde deneysel sonuçlarla karşılaştırılmasını içerecektir.

IP 3.1: *Elastik yırtılma kuramı için sonlu elemanlar yöntemi*

IP 1.1de belirtilen faz alanı yaygın çatlak modeli mekanik hareket ve hasar oluşumu ve evriminin etkileşim içinde olduğu çoklu-fizik problemi olup her alt problemin çözümü için geliştirilecek sonlu elemanlar yöntemi tabanlı sayısal algoritmalar ardışık olarak çözülecektir. Öncelikle mekanik hareket denklemi sabit hasar için çözülecek. Elde edilen deplasman sonuçları lokal olmayan hasar evriminin çözümünde kullanılacaktır. Bu kapsamda diferansiyel denklemlerin öncelikle zayıf bicimi (integral biçimi) elde edilecek ve Galerkin yöntemi ile sonlu elemanlar metodu geliştirilecektir. Zaman aralığında ise artırımlı algoritmalar geri-Euler yöntemi (backward Euler method) yöntemi hasar evrimi için kullanılmıştır.

IP 3.2: *Viskoelastik yırtılma kuramı için sonlu elemanlar yöntemi*

IP 1.2de belirtilen çalışmalar viskoelastik yırtılma kuramı için tekrarlanacaktır. Bunun yanı sıra kullanılacak viskoelastik bünye denkleminde viskoz deformasyon evrimi lokal olarak artırımlı

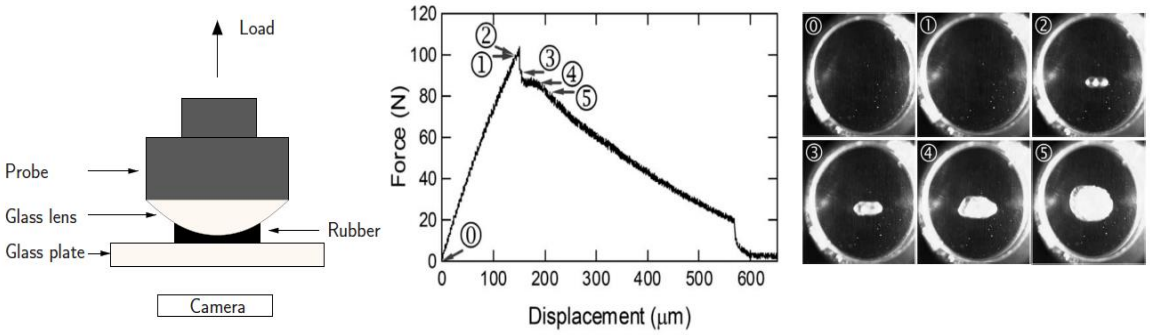
olarak çözülecek ve sonlu elemanlar yönteminin tutarlı teğet (consistent tangent) ikinci dereceden yakınsaklık göstermesi (quadratic convergence) sağlanacaktır.

IP 3.3: *Çok-ölçekli kavitasyon büyüme modeli için sonlu elemanlar yöntemi*

IP 2.1 ve IP 2.2de geliştirilecek kuram için sayısal gerilme ve teğet tensorleri derivasyonları ve bunların algoritmik olarak uyarlanması gerçekleştirilecektir. Bu bağlamda mikro ölçekte sayısal homojenizasyon, Gauss tümlevi ve Bazant-Oh yüzey tümlevi kullanılarak efektif gerilme ve teğet tensorleri oluşturulacaktır. Kavitasyon evrimi için artırımlı zaman aralığında güncelleme algoritmaları geliştirilecek ve bilgisayar uygulamaları tamamlanacaktır.

IP 4: Doğrulama Çalışmaları ve Üç boyutlu yüksek ölçekli simülasyonlar

Son olarak geliştirilen kuramlar ve algoritmalar iki ve üç boyutlu kauçuktan oluşan yapısal elemanlar üzerinde gerçekleştirilecek simülasyonlarla doğrulanacak ve elde edilen bu sonuçlar diğer sonuçlarla birlikte yayınlanacaktır.



Şekil 2. Cristiano ve ark. [12] calismasindan alinan kavitasyon başlangıcı ve büyümesini gösteren deneysel çalışma ve yük-deplasman eğrisinin farklı aşamalarının fotoğraflarla gösterimi

IP 4.1: *Elastik yırtılma kuramı için doğrulama çalışmaları*

Geliştirilen elastik faz alanı yaygın çatlama modeli ve yırtılma kriterinin iki ve üç boyutlu simülasyonlar yardımıyla literatürde var olan yarı-durağan yükleme koşulları altında gerçekleştirilen deneysel sonuçlarla doğrulanacaktır.

IP 4.2: *Viskoelastik yırtılma kuramı için doğrulama çalışmaları*

Geliştirilen elastik faz alanı yaygın çatlama modeli ve yırtılma kriterinin iki ve üç boyutlu simülasyonlar yardımıyla literatürde var olan farklı hızlarda gerçekleştirilen yükleme koşulları altında gerçekleştirilen deneysel sonuçlarla doğrulanacaktır, bakınız **Şekil 2**.

IP 4.3: *Çok-ölçekli kavitasyon büyüme modeli için doğrulama çalışmaları*

Geliştirilen kavitasyon oluşumu ve kavitasyon büyüme modeli iki ve üç boyutlu simülasyonlar yardımıyla literatürde var olan farklı hızlarda gerçekleştirilen yükleme koşulları altında gerçekleştirilen deneysel sonuçlarla doğrulanacaktır.

2. Literatür Özeti

2.1 Kauçuk türü malzemelerin hiperelastik davranışı

Kauçuk türü malzemelerin mekanik davranışının en belirgin özelliği eş hacimli büyük deformasyonlar sergileyebilmesidir. Bu davranış istatistiksel mikro-mekaniğin temel ilkeleriyle kuramsal olarak açıklanabilmektedir, bakiniz Treloar [62]. Kauçuk veya bir başka deyişle elastomerlerin mekanik davranışı uzun polimer zincirlerinin çapraz bağlarla oluşturduğu ağların hareketinin istatistiksel mekanik ilkeleriyle açıklanmasına dayanır. Elastomerlerin yük altında şekil değiştirmesi kristal yapıya sahip malzemelerin aksine uzun polimer zincirlerinin asal gerilmeler yönünde daha düzgün bir konformasyona geçmesi şeklinde olur. Bu davranış entropik elastisite olarak da bilinmektedir. Polimer zincirlerinin istatistiksel olarak alabileceği konformasyonların entropik elastisite kuramı ile birleştirilmesi Kuhn [32, 33], Kuhn & Grün [34], Treloar [62], Flory [16] çalışmalarında detaylı bir şekilde ele alınmıştır. Bu çalışmalar tek bir polimer zincirinin deformasyona bağlı olarak depoladığı serbest enerjinin *Langevin* tarzı enerji fonksiyonu ile ifade edilebildiğini göstermiştir. Bu kuramı temel alarak makroskopik davranışı ele alan kauçuk modellerine ağ modelleri de denmektedir. Bu bağlamda sırasıyla *tam ağ modeli* (Treloar [60], Treloar & Riding [63]), *üç zincir modeli* (Wang & Guth [65]), *sekiz zincir modeli* (Arruda & Boyce [2, 9]) ve *mikro-küre modeli* (Miehe ve ark. [46]), zincirlerin makroskopik olarak temsili geometrik senaryolarla ifade edilmesine dayanarak geliştirilmiştir.

Yukarıda belirtilen mikromekanik temellere dayalı entropik ağ modellerinin yanısıra tamamen görüngüsel temelli modeler de geliştirilmiştir. Bu fenomenolojik modeller deney sonuclarını büyük ölçüde yakalayan, deformasyon gradyanının sabitleri veya öz değerlerinin polinom, logaritmik ve üstel fonksiyonları şeklinde ifade edilmesiyle oluşturulmuştur. Bu kapsamda geliştirilen modeller sırasıyla;

- *Deformasyon sabitlerine dayalı modeller:* neoHooke modeli [61], Mooney Rivlin modeli [49, 56], Yeoh modeli [66], …
- *Asal gerilmelere dayalı modeler*: Ogden modeli [50, 51], tüp modeli Kaliske & Heinrich [25], Shariff Model [59],..

Bahsi geçen tüm modeller, doğrusallaştırıldığında neo-Hooke modeli elde edilir. Bunun yanısıra fiziksel sekiz-zincir ağ teorisi polimer zincirinin sonsuz uzun kabul edildiği durumlarda neo-Hooke modelini sağlar. Bahsedilen ağ modelleri genelde idealize edilmiş serbest zincir hareketinin istatistiksel dağılımı göz önünde bulundurularak türetilmiştir. Üç boyutlu ağların birbirleri üzerinde uyguladıkları topolojik kısıtları göz önünde bulunduran modellere *kısıtlı birleşim modelleri* veya *kısıtlı bilezik modelleri* denmektedir. Bu kapsamda Flory & Erman [Flory82], iyileştirilmiş sekiz-zincir modeli Arruda & Boyce [2, 9] ve mikro-küre modeli [46] kısıtlı birleşim modellerine örnek olarak verilebilir. Deam & Edwards [14], Heinrich & Straube [24] ve Heinrich & Kaliske [Heinrich97, 24] modelleri kısıtlı bilezik modeline dayalı etkileri göz önünde bulunduran modellerdir.

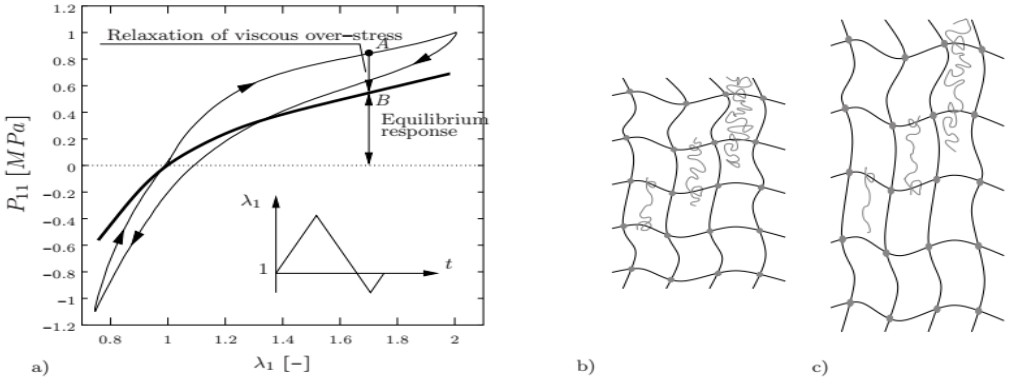
2.2 Kauçuk türü malzemelerin elastik ve viskoelastik yırtılma davranışı

Kauçuk türü malzemelerin mekanik davranışı, özellikle elastik davranışı iyi çalışılmış bir alan olup mevcut modeller kalitatif ve kantitatif olarak gerilme-gerinim davranışını başarılı bir şekilde modelleyebilmektedir. *Elastomerlerin kırılma tokluğu , çatlak oluşumu ve çatlağın ilerleyişi söz konusu olduğunda aynı durum maalesef geçerli değildir. Yapılan bir çok deneysel calismaya rağmen, maalesef hala fiziksel temellere oturmuş bir kuram ve sayısal model ihtiyacı giderilememiştir.*

Kauçuk türü malzemelerin *kırılma tokluğu* ile ilgili en temel hesaplamalar malzemenin istatistiksel mikroskobik yapısına dayandırılmaktadır. Polimer ağının makroskobik yırtılması, moleküler düzeyde oluşan kopmaların kolektif sonucudur. Polimer zincirleri yüklendiğinde öncelikle uzar ve monomerler düzenli bir şekilde deformasyon doğrultusunda sıralanır. Yükleme devam ettirilirse zincir gövdesindeki kovalent bağlar veya bağlantı noktalarındaki çapraz bağlardan kopar. Kauçuğun yırtılma davranışı konusunda ilk çalışmalar Rivlin & Thomas [Rivlin53], Thomas [Thomas55], Greensmith & Thomas [22], Greensmith [23] tarafından gerçekleştirilmiştir. Bu çalışmalarda, *eşik makroskobik kırılma tokluğu*, veya bir başka deyişle *yırtılma enerjisi* Griffith [Griffith20] yaklaşımıyla *eşik enerji bırakma nispeti* şeklinde tanımlanmış ve deneysel çalışmalarla kantitatif olarak tespit edilmiştir. Kuramsal açıdan öncü niteliğindeki çalışmalarında Lake & Thomas [35], deneysel gözlemlere dayanarak basit bir *moleküler-kuramsal model* geliştirmişlerdir. Daha sonra gerçekleştirilen çalışmalar, bu kurama bağlı olarak hesaplanan yırtılma enerjisinin gerçekte deneylerle elde edilen sonuçların

çok altında olduğu ortaya çıkmıştır. Bu fark genelde ek enerji yutucu mekanizmaların varlığına dayandırılmıştır. Kauçuk türü malzemelerin yırtılma enerjisinin çekme hızı ve çatlağın ilerleme hızına bağlı olarak, çatlak ucundaki viskoelastik direnç nedeniyle, değişim göstermektedir. Yüksek hızlarda birim çatlak yüzeyi elde etmek düşük hızlara oranla çok daha yüksek enerji gerektirmektedir, bakınız Persson ve ark. [Persson05a]. Bu durumda çatlağın ilerlemesine karşın iki direnç mekanizması vardır. Birincisi elastik ağın yırtılması nedeniyle oluşan direnci ikincisiyse sekonder ağın yani viskoelastik davranışa neden olan birbiriyleriyle çapraz bağlarla bağlı olmayan serbest zincirlerin gösterdiği dirençtir, bakınız Persson & Brener [Persson05b], Kroon [31].

Kauçuk türü malzemeler malzemeye yük etkilerinin kalkmasıyla birlikte malzemeyi ilk pozisyonuna geri döndüren birincil (elastic network) elastik ağ ve malzemenin gerilme-gerinim davranışının yükleme hızına bağlı olmasına ve de yükleme-boşaltma eğrileri arasında histeretik davranışa neden olan ikincil ağl (superimposed) oluşmaktadır, bknz **Şekil 3**. İkincil ağ esasında gerçek anlamda bir ağ yapısını ifade etmez. Bağımsız olarak serbest hareket eden farklı uzunluklarda polimer zincirlerinden oluşmaktadır. Bu zincirler birincil ağdaki zincirlere dolandığından anlık yüklemelerde yalancı bağlar (entanglement) oluştururlar. Bu serbest zincirler kauçuk türü malzemeler yüksek hızlarda yüklenmesi durumunda malzemenin rijitliğine ciddi anlamda katkıda bulunurlar. Malzemenin anlık olarak deplasmana maruz kalması ve bu deplasman düzeyinde tutulması durumunda ikincil ağdaki zincirler Brown hareketi ve sürünme hareketi göstererek dolandığı zincirlerden kurtularak uzar ve üzerindeki yükü boşaltır. Kauçuk türü malzemelerde gözlemlenen gerilme yumuşaması (stress relaxation) olgusu temelde bu şekilde açıklanmaktadır. İkincil ağlar kauçuk türü malzemelerin titreşim sönümleme, enerji soğurumu gibi bir çok endüstriyel uygulamada kullanılmasına olanak sağlamaktadır.



Şekil 3. (a) Kauçuk türü malzemelerin gerilim-uzama eğrisi histerezis davranış sergilemektedir. (b) Kauçuk birincil elastik ve viskositeye neden olan ikincil ağın denge durumundaki şematik gösterimi, (c) kauçuk ağın yükleme altında deforme olmuş birincil ve ikincil ağların anlık şematik gösterimi. (Çizim: Schanzel, Dal, Miehe [57], ve Schanzel [58])

Proje kapsamnıda kauçuk türü malzemeler için Miehe ve Schanzel [48] tarafında önerilen faz alanı kuram temel alınarak sayısal olarak Fortran tabanlı FEAP açık kaynak programına kullanıcı malzeme ve eleman altprogramları geliştirilmiştir. Teorik ve sayısal çalışmalar için doğrulama çalışmaları tamamlanmıştır. Bunun yanısıra belirtilen çalışmada varolan eksiklikler tespit edilmiş, ilk aşamada Neo-Hooke tabanlı bünye denklemleri kullanılarak geliştirilen bu kuram mikro-küre tabanlı bir kuram haline dönüştürülmüştür. Bu şekilde kauçuk türü malzemelerin gerilim-gerinim davranışını %50 gibi çok düşük gerinim düzeylerine kadar ve ancak tek eksenli çekme deneylerinde sağlıklı sonuç veren Neo-Hooke modeli (bakınız **Şekil 4**) yerine kauçuk türü malzemeleri %600 düzeylerinde gerinim düzeylerine kadar her üç deformasyon koşullarında (tek eksenli çekme, çift eksenli çekme ve saf kesme deformasyonları) mükemmel modelleyebilen mikro-küre modeli kullanılmıştır, bakınız **Şekil 5**. Bunun yanısıra çatlak başlangıç kriteri olarak asal gerilmeler, enerji ve von-Mises gerilmeleri tabanlı farklı çatlak oluşum kriterleri için karşılaştırmalı sayısal çalışmalar başlatılmış bunların literatürde sınırlı sayıda yer verilen kopma yüzeyleri eğrileriyle uyumu araştırılmıştır. Bunun yanısıra ikinci mertebe faz-alanı çatlak oluşumu kuramında yer alan degradasyon fonksiyonu için alternatif çözümler geliştirilmektedir. Bu noktada amacımız Miehe ve Schanzel kuramında çatlak başlamasını müteakiben gözlemlenen gevrek davranışın sünek davranışa geçişini sağlamaktır. Daha doğrusu ideal gevrek ve ideal sünek yırtılma arasında ortalama bir yük-deplasman eğrisi yakalamaktır.

2.3 Kauçuk türü malzemelerde kavitasyon oluşumu ve kavitasyon büyümesi

Sıkıştırılabilir hiperelastik davranış sergileyen gözenekli polimerik malzemeler, yüksek enerji emme ve gürültü azaltma gibi özellikleri sayesinde mühendislik uygulamalarında sıkça kullanılmaktadır. Kauçuk benzeri malzemelere yönelik geleneksel sıkıştırılmaz hiperelastik yapısal modeller bol olmasına rağmen, bu malzeme sınıfı için, işlevsel fakat nispeten basit kapsamlı bir model ihtiyacı bulunmaktadır. Gözenekli elastomerlerin sıkışabilir mekanik tepkileri, üretim süreci boyunca bilerek veya istemeden oluşan boşluklardan kaynaklanmaktadır. Gözenekli elastomerlerin mekanik davranışı özünde, mevcut olan boşlukların yüksek üç eksenli gerilmeler altında ani bir şekilde büyümesine bağlanan kavitasyon ile ilişkilidir. Malzemenin kapalı çatlaklarına yol açan boşlukların başlaması, büyümesi ve birleşmesi, kavitasyon çalışmalarının konusudur [1]. Kavitasyon aynı zamanda olağandışı kauçuk yırtılması olarak da bilinmektedir. Bu olağandışı bir durumdur, bu sebeple bu olguya olağandışı kauçuk yırtılması ya da kavitasyon denir. Bununla ilgili poker fişi olarak isimlendirilen çekme deneyleri, iç çatlakların yırtılma fenomenini, uygulanan gerinmenin numunenin merkezinde olan bölgesel hacim değişimine eşit olduğu durum ile açıklanan matematiksel tanımlar kullanır. Kavitasyon, kritik hidrostatik gerilme seviyesine ulaşıldığında başlar ve kendini kuvvet-deplasman eğrilerinde bir kırılma noktası olarak gösterir. Bu ise, kavitasyon kenarlardan sınırlanmış numunelerin çekilmeleri ardından yapılan analizde gözlemlenebilir. Gent & Lindley [18], hidrostatik gerilimeye maruz kalan boşlukların kritik değerini hesaplamıştır. Matematiksel açıdan kavite çekirdeklenmesi, sıkıştırılamaz doğrusal olmayan esneklikteki kararlılık kaybına karşılık gelir. Bu bağlamda [6], Ball radial çekmeye maruz kalan katı bir küreyi göz önüne almıştır. Bu durumda, kritik hidrostatik gerilimde (pcr = 2.5μ. Burada μ kesme modülüdür) budaklanma noktası kavitasyon çekirdeklenmesine tekabül etmektedir. Ball [3] tarafından bulunan kritik gerilimin analitik sonuçları, Gent ve Lindley'in [18] yaptığı çıkarımla örtüşmektedir. Horgan & Abeyaratne [28], bu tür bir analizin bir kürenin içerisinde halihazırda kavite içeren sonsuz başka küçük bir kürenin olduğu durumun incelenmesine benzediğini ve sınır durumunda özdeş çözüme yol açtığını göstermiştir. Hou & Abeyaratne [29], bu çözümleri, mevcut boşluklar için genel bir gerilme durumuna genelleştirmiş ve Ball'un radyal simetrik deformasyonlar için matematiksel sonucunu elde etmiştir. Mikroyapı ile gözenekli malzemenin makroskopik mekanik tepkisi arasındaki ilişki elastomerlerde çok önemlidir. Bu ilişki analitik ve FE^2 (FE=Finite Element) çok ölçekli tabanlı hesaplamalı homojenleştirme yaklaşımları açısından aktif bir araştırma alanı olmuştur.

Analitik çözümler ya fenomenolojiktir ya da homojenizasyon konseptlerine dayanır. Sonlu deformasyonlar altındaki düşük yoğunluklu köpüklerin mekanik tepkisi için GIBSON & ASHBY [20] monografisine başvurulabilir. Geleneksel olarak, kauçuk benzeri malzemeler sıkıştırılamaz olarak kabul edilir ki, kesme deformasyonları fenomenolojik hiperelastik modellerle veya ağ tipi fiziksel hiperelastik modellerle tanımlanır. Hafif sıkıştırılabilirlik, matematiksel denklemlere ilave bir hacimsel ceza (penalty) fonksiyonu olarak eklenebilir. Bu modeller, ya sıkıştırılamazlık uygulamak için tamamen matematiksel olabileceği gibi Horgan & Murphy [26, 27] 'de özetlendiği gibi deneysel olarak gözlenen hacim değişikliklerini tanımlamak için fenomenolojik tabanlı da olabilir. Bu tür yaklaşımların uygulanması sadece kısmen-sıkıştırılamaz davranışla kısıtlıdır ki boşlukların hacim fraksiyonları ihmal edilemez derecede küçüktür ve sıkıştırılabilirlik ile gözeneklilik arasındaki fiziksel bağlantıdan yoksundurlar. Sıkıştırılabilir poliüretan köpükler için geliştirilen Blatz & Ko [5] fenomenolojik modeli bu çalışmada ele alınmıştır. Ogden [50], Voigt tipi homojenleştirme sınırlarına dayanan sıkıştırılabilir bir hiperekastik modeli önermiştir. Yukarıda bahsedilen yaklaşımlara alternatif olarak, ikinci dereceden homojenleştirme tekniği olan Lopez-Pamıes & Ponte Castenada [38, 39]'nın yaklaşımı verilebilir. Bu konseptin, efektif davranışı eş-yönlü Gent-tipi matris olan malzemelere [19] uygulanması genel olarak Lopez-Pamies & Ponte Castaneda [40, 41] çalışmasında verilmiştir. Özyinelemeli homojenizasyon yönteminin neo-Hooke katıların kavitasyon fenomenine uygulanması Lopez-Pamıes ve. Ark. [42, 43, 44]'nda yakın zamanda ele alınmıştır. Küresel mezo-yapı içinde bulunan küresel halihazırdaki kavite için Hou ve Abeyaratne [29]'nin analitik yaklaşımı, detF=1 (ideal sıkıştırılamazlık) durumundaki sıkıştırılamaz bir malzeme için makul deformasyon alanında tam bir çözüm sunmaktadır. Bu şekildeki bir deformasyon alanı Danielsson ve Ark. [13]'da da açıklandığı gibi neo-Hook katılar için ek bir parametre (boşlukluluk) olduğu durumda kapalı yapıda bir çözüm sunmaktadır. Bu yaklaşım ilk değişmezin mezo-küre üzerinde homojenizasyonuna dayanmaktadır. Yukarıda

belirtilen yöntemler ya çok basitçedir veya sadece hedef bir malzeme tipi modelinin doğrusal olmayan hiperelastik kurama genişletilmesi şeklindedir ki bu da zorlayıcı matematiksel türetmelere ihtiyaç duymaktadır ve sonlu elemanlar yöntemi için sorun teşkil etmektedir. Hesaplamalı homojenizasyon yöntemleri için Miehe [45], Geers ve Ark. [17]'a ve bunların içerisindeki refenasnlara başvurulabilir. Bu yöntemler matematiksel ideallikten uzak boşluklu rastlantısal mikro yapıdaki malzemeler için önemli olabilmektedir. Fakat bu yöntemler, büyük ve kapsamlı simulasyonlarda hesaplama açısından zorludur. Analitik homojenizasyon yöntemlerinin karmaşıklığı ve çok-ölçekli yöntemlerin hesaplama zorluğu arasında bir tercih yapılması gerekmektedir. Dahası, kavite büyümesi sebebiyle oluşan mekanik bozunumun incelenmesi, tabiatı gereği boşluklu hiperelastik cevabın doğru bir tanımına ihtiyaç duymaktadır. Mevcut hiperelastik bünye denklemleri genelde sıkıştırılamaz kabul edilen kauçuğun hidrostatik yüklemeler altındaki davranışını ele almaz. Hidrostatik çekme gerilmelerinin belli bir eşik değerinin altında kaldığı durumlarda bu kabul hesaplamalarda ciddi bir hata unsuru oluşturmaz. Fakat geometrik nedenlerle yüklemede yüksek hidrostatik çekme gerilmesine maruz kalan malzeme çatlak yerine kavitasyon denen gözenekler oluşturur. Bu gözenekler artan yükler altında tersinemez bir şekilde büyür ve sonuç olarak sıkıştırılamaz davranış yerine sıkıştırılabilir mekanik davranış gözlenmeye başlar. Malzemenin kesme gerilmelerine, tek yönlü veya çift yönlü şekil değiştiren deformasyonlara maruz kalırken yırtılma şeklinde bir başarısızlık gösterirken (failure) üçeksenli eşit gerilmeler altında kavitasyon şeklinde bir başarısızlık sergiler. Konvansiyonel modeller hidrostatik şekil değiştirme deformasyonlarını içeren yüklemeler altında başarılı sonuçlar vermemektedir. Bunun yanı sıra kauçuk türü malzemelerin hidrostatik yükler altında sergilediği kabarcık oluşumu (cavity formation) ve bu kabarcıkların tersinemez büyümesini ele alan sınırlı sayıda kuram bulunmaktadır ve bu kuramlar kavitasyon fenomeni için genel bir yaklaşım sunmaktan çok uzaktır. Çok ufak ölçekte bir boşlukluluğun elastomerik malzemeler içerisinde yer edinmesinin gerçel ölçekte önemli mekanik cevap değişikliğine neden olması çok iyi bilinen bir gerçektir. Bu davranım, yarı-sıkıştırılamazlıktan sıkıştırılabilirliğe geçiş olgusu sebebiyledir. Klasik süreklilik hasar mekaniği yöntemleri için Chaboche [10, 11], Kachanov [30] ve Lemaitre [36]'ye başvurulabilir. Böylesi teoriler bu geçişi açıklayamamaktadır çünkü kavitasyona göre bozunum ölçeksel seviye parametresi veya bir başla deyişle hasar parametresi "*d*"nin doğrusal bir fonksiyondur. Bu parametre bozunmuş malzemenin sağlam malzemeye hem balk hem de kesme modülü için oranı şeklindedir. d=0 malzemenin matematiksel olarak intakt-zarar görmemiş halini tanımlarken d=1 malzemenin tamamen hasar görmüş ve mekanik anlamda yük aktarma özelliğini yitirmiş halini temsil etmektedir.

3. Gereç ve Yöntem

Çalışmalar katı cisimler mekaniği, viskoelastik malzeme kuramı, hasar mekaniği prensipleri kullanılarak geliştirilmiştir. Hasar oluşumunu belirleyen faz alanı denklemleri ile hareket ve deformasyonu belirleyen doğrusal momentum denklemi akuple bir şekilde varyasyonel hesap yöntemi kullanılarak problemler ile varyasyonel yöntemler kullanılarak eğer noktası dengesi bulunarak (saddle point equilibrium) çözülmüştür. Sayısal olarak malzeme noktalarında elde edilen evrim denklemleri geriye doğru Euler integrasyonu (backward Euler integration) kullanılarak çözülmüştür. Sınır değer problemlerinin çözümünde ise doğrusal olmayan sonlu elemanlar yöntemi kullanılmıştır. Sonlu elemanlar yöntemi algoritmaları geliştirilirken malzeme ve geometrik yönden doğrusal olmayan davranış dikkate alınmıştır. Sayısal çalışmalar açık kaynak kod programı FEAP 8.3 (UC Berkeley) içine kullanıcı tanımlı malzeme ve eleman programları FORTRAN dili kullanılarak entegre edilmiştir. Sonuçların gösterimi (postprocessing) için TECPLOT akademik yazılımı kullanılmıştır.

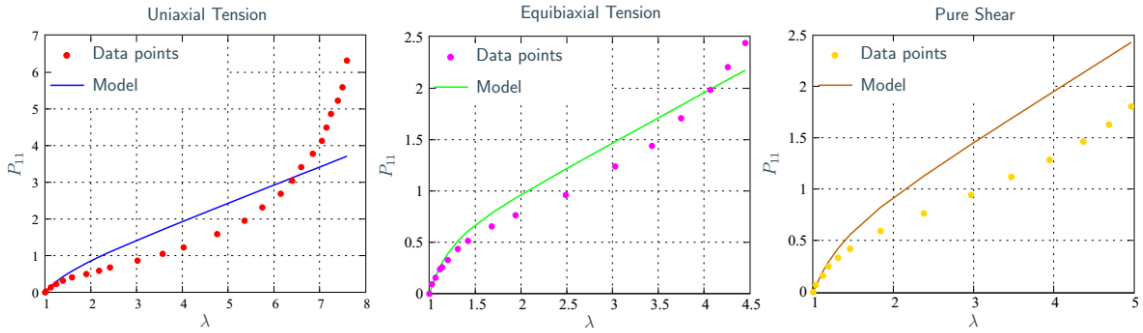
3.1 Kauçuğun Elastik Yırtılması Konusunda Gerçekleştirilen Çalışmalar

3.1.1 Elastik Yırtılma için Kuramsal Çalışmaların Özeti

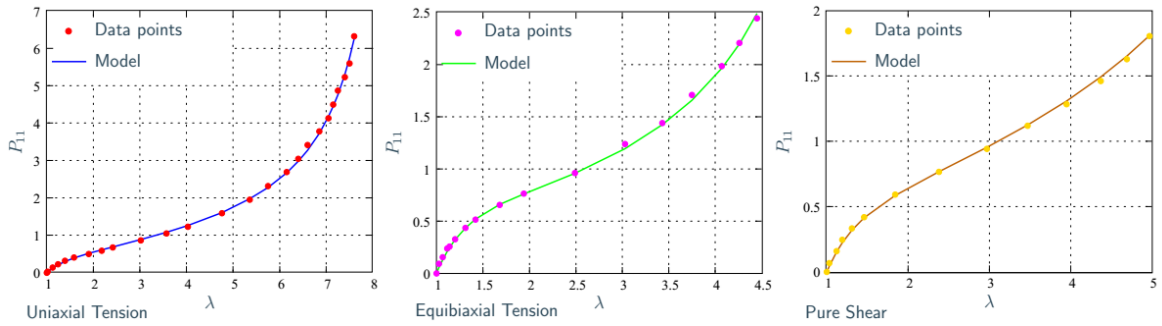
Çok alanlı problemin çözümü için birleşik varyasyonel prensibine (mixed variational principle) dayalı potensiyel denklemi aşağıdaki gibidir.

$$\underbrace{\Pi_\lambda(\dot{\varphi}, \dot{d}, \beta, \lambda)}_{potential} = \underbrace{\mathcal{E}(\dot{\varphi}, \dot{d})}_{rate\ of\ pot.\ energy} + \underbrace{D^*_\lambda(\dot{d}, \beta, \lambda)}_{dissipation} - \underbrace{P(\dot{\varphi})}_{external\ power}$$

Toplam potansiyel potansiyel enerji değişim hızı, çatlak ilerlemesinden oluşan sönümleme oranı, ve dış güç (external power) ifadelerinden oluşur. Denge durumunda potansiyel enerji değişim hızı ve çatlak ilerlemesinden oluşan sönümleme oranının toplamı dış kuvvetlerin yaptığı birim zamanda yaptığı işe eşit olmak zorundadır. Yukarıdaki ifadede φ cisimin içindeki herhangi bir noktanın deforme oluşmuş konfigurasyonunu, d s faz alanı parametresini ifade etmektedir. d=0 malzemenin intakt-hasarsız halini, d=1 malzemenin tamamen hasar görmüş durumunu ifade etme olup ara değerler malzeme noktasının kısmi hasarlı durumlarını ifade etmektedir.



Şekil 4. Neo-Hooke modelinin Treloar deney verisine (a) tek eksenli çekme (b) çift eksenli çekme (c) saf kesme deformasyonları altında birlikte elde edilen en uygun (best fit) eğrileri.



Şekil 5. Mikro-küre modelinin [46] Treloar deney verisine (a) tek eksenli çekme (b) çift eksenli çekme (c) saf kesme deformasyonları altında birlikte elde edilen en uygun (best fit) eğrileri.

Bu denge koşulunu matematiksel olarak tanımlayan varyasyonel prensibi

$$\{\dot{\varphi}, \dot{d}, \beta, \lambda\} = \mathrm{Arg}\{ \underset{\dot{\varphi}, \dot{d}, \beta, \lambda \geq 0}{\mathrm{stat}} \ \Pi_\lambda(\dot{\varphi}, \dot{d}, \beta, \lambda) \}$$

şeklinde ifade edilebilir. Varyasonel prensibin Euler-Lagrange denklemleri aşağıdaki gibi özetlenebilir.

$$\begin{aligned}
(1): \quad \mathrm{Div}[\boldsymbol{P}] + \bar{\boldsymbol{\gamma}} &= \mathbf{0} \ , \\
(2): \quad \dot{d} &\geq 0 \ , \\
(3): \quad f - g_c \delta_d \gamma_l &\leq 0 \ , \\
(4): \quad \dot{d}(f - g_c \delta_d \gamma_l) &= 0 \ .
\end{aligned}$$

(1) numaralı denklem ifade momentum denklemini, (2-4) numaralı denklemler çatlak faz alanının zamana bağlı evolusyon denklemlerini ve termodinamiğin ikinci yasasındaki tersinemezliği enforse eden yükleme-boşaltma koşullarını ifade eder. Çatlağın ilerlemesi esnasında aşağıdaki ikinci mertebe elliptik denklem devreye girer.

$$\frac{g_c}{l}[d - l^2\Delta d] = 2(1-d)\mathcal{H}$$

Burada g_c çatlak yüzey enerjisini l çatlağın ölçek boyutu parametresini $\mathcal{H}$ çatlak itici gücü (crack driving force) olarak çalışan enerjetik terimdir. Çatlağın olmadığı ilk değer durumunda

$$\mathcal{H}_0 := \mathcal{H}(\boldsymbol{X}, t = t_0) = 0$$

olarak ifade edilir.

Çatlak başlangıcı ve ilerlemesi $[t_n, t]$ diskret zaman aralığında doğrusal momentum ile çatlak evrim denkleminin aşamalı olarak çözümüyle elde edilir. Çatlak oluşmaya başladıktan sonra zamana bağlı olarak çatlağın ilerlemesine neden olan itici güç kaynak terimi $[t_n, t]$ diskret zaman aralığında şu şekilde güncellenir

$$\mathcal{H} = \begin{cases} \psi_0(\nabla\boldsymbol{\varphi}_n) & \text{for } \psi_0(\nabla\boldsymbol{\varphi}_n) > \mathcal{H}_n \ , \\ \mathcal{H}_n & \text{otherwise} \ . \end{cases}$$

Yine $[t_n, t]$ diskret zaman aralığında çatlak potansiyeli aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\Pi_d^\tau(d) = \int_{\mathcal{B}} \left[g_c\gamma_l(d, \nabla d) + \frac{\eta}{2\tau}(d - d_n)^2 - (1-d)^2\mathcal{H} \right] dV$$

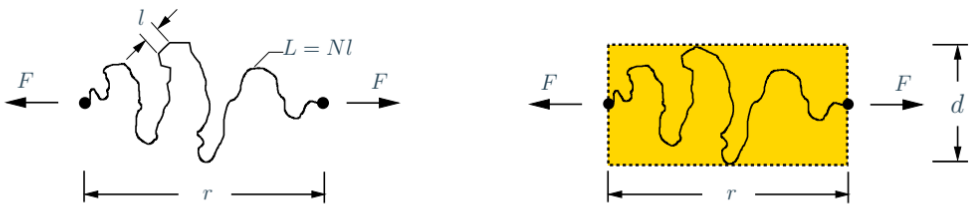
Doğrusal momentum denklem ifadesinin $[t_n, t]$ diskret zaman aralığındaki ifadesi ise aşağıdaki gibidir

$$\Pi_{\boldsymbol{\varphi}}^\tau(\boldsymbol{\varphi}) = \int_{\mathcal{B}} [\psi(\nabla\boldsymbol{\varphi}; d) - \bar{\boldsymbol{\gamma}} \cdot \boldsymbol{\varphi}] dV - \int_{\partial\mathcal{B}_t} \bar{\boldsymbol{t}} \cdot \boldsymbol{\varphi} dA$$

Bu iki denklem sonlu elemanlar yöntemiyle FEAP açık kaynak kodlu programına kodlanmıştır. Serbest enerji fonksiyonu ψ mikro-küre modeliyle modellenmiştir. Mikro-küre modeli, polimer zincirlerinin serbest ve kısıtlı ortamda istatistiksel mekanik ilkeleriyle enerji fonksiyonunun bulunması ve ağı oluşturan zincirlerin ortalama dağılımını afin olmayan p'inci mertebeden kök (p-kök) ortalama (p-root averaging) yöntemiyle bulunması ilkesine dayanmaktadır. *Mikro-küre modelinin kullanılması kauçuk numunelerin makroskopik yük deplasman eğrilerinin iyileştirilmesinden çok çatlak ucundaki gerilim dağılımının ve buna bağlı olarak çatlak başlangıç ve çatlak yönü tayinlerinin daha yüksek hassasiyetle elde edilebilmesine olanak sağlamaktadır.*

Bu kapsamda, mevcut araştırmada sonlu elemanlar yöntemi için malzeme altprogramı olarak FORTRAN tabanlı FEAP yazılımına entegre edilen mikro-küre modelinin serbest zincir davranışı **Şekil 6** ve **Tablo 1**'de verilmektedir.

Mikro-küre modeli diğer ağ modellerinden farklı olarak sadece zincirlerin serbest uzama hareketine dayanmaz. Zincirlerin üç boyutlu uzayda birbirine dik yönde geçen ağların birbiri üzerine uyguladıkları topolojik kısıtlamalar tüp-modeli olarak adlandırılan zincirledin d çapında ideal bir tüp içinde hareketini ele alan ek bir fonksiyonla ele alınır. **Şekil 7**'de ise mikro-küre modelinin tüp kısmınının iki boyutlu görseli ve temel fonksiyonları görülebilir.



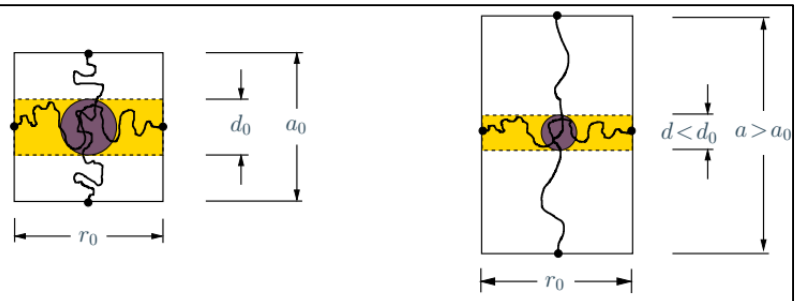
Undeformed end–to–end distance of a chain	$r_0 = \sqrt{N}l$
Microscopic stretchs	$\lambda := r/r_0 = r/\sqrt{N}l \ , \quad \lambda_r := r/L = \lambda/\sqrt{N}$
Constraining tube area contraction	$\nu := (d_0/d)^2$

Şekil 6. Serbest ve kısıtlı zincir kinematik olarak boyuna uzama $\boldsymbol{\lambda}$ ve enine alan kısalması $\boldsymbol{\upsilon}$ ile ifade edilmektedir. Bu iki kinematik parametre serbest enerji fonksiyonunun argümanlarını oluşturmaktadır.

$$W = \bar{\Psi}_f(\boldsymbol{g}; \bar{\boldsymbol{F}}) + \bar{\Psi}_c(\boldsymbol{g}; \bar{\boldsymbol{F}})$$

Microscopic chain stretch	$\lambda = \langle \bar{\lambda} \rangle_p := \left[\frac{1}{\lvert \mathscr{S} \rvert} \int_{\mathscr{S}} \bar{\lambda}^p \, dS \right]^{1/p}$
Contribution to the free energy	$\bar{\Psi}_f(\boldsymbol{g}; \bar{\boldsymbol{F}}) = n \psi_f(\langle \bar{\lambda} \rangle_p)$
Explicit form of the free energy	$\bar{\Psi}_f(\boldsymbol{g}; \bar{\boldsymbol{F}}) = \mu N \left[\langle \bar{\lambda}_r \rangle_p \mathcal{L}^{-1}(\langle \bar{\lambda}_r \rangle_p) + \ln \frac{\mathcal{L}^{-1}(\langle \bar{\lambda}_r \rangle_p)}{\sinh \mathcal{L}^{-1}(\langle \bar{\lambda}_r \rangle_p)} \right] , \ \mu := nk\theta$

Tablo 1. Mikro-küre modelinin serbest enerji fonksiyonu serbest zincir davranışı ile alan kısıtının enerjetik katkılarının ayrı ayrı ele alındığı iki komponentin toplamı ile ifade edilir. Serbest zincir uzaması her bir zincir $\bar{\boldsymbol{\lambda}}$ uzamalarının p-kök ortalaması ile tek bir ortalama makroskopik uzama $\boldsymbol{\lambda}$ değerinin elde edilmesi ve bu değerin Langevin serbest enerji fonksiyonuna entegre edilmesiyle elde edilir.



• Micro–tube contraction	$\nu = (\bar{\nu})^q$
• Contribution to the free energy	$\bar{\Psi}_c(\boldsymbol{g}; \bar{\boldsymbol{F}}) = \langle n \psi_c(\bar{\nu}^q) \rangle$
• Explicit form of the free energy	$\bar{\Psi}_c(\boldsymbol{g}; \bar{\boldsymbol{F}}) = \mu N U \langle \bar{\nu}^q \rangle , \quad U := \alpha (l/d_0)^2$
• Kirchhoff stresses	$\bar{\boldsymbol{\tau}}_c = -n \langle \psi_c' q \bar{\nu}^{(q-2)} \, \boldsymbol{n} \otimes \boldsymbol{n} \rangle$

Şekil 7. Mikro-küre modeli tüp kısmının şematik gösterimi ve enerji fonksiyonu ve gerilim ifadelerinin tablosal gösterimi: Mikro-küre modelinin tüp-kısıt komponentinin serbest enerji fonksiyonunun enine alan kısalması $\boldsymbol{\upsilon}$ parametresine bağlı olarak modellenir. Çizim Miehe et al.[46]'dan alınmıştır.

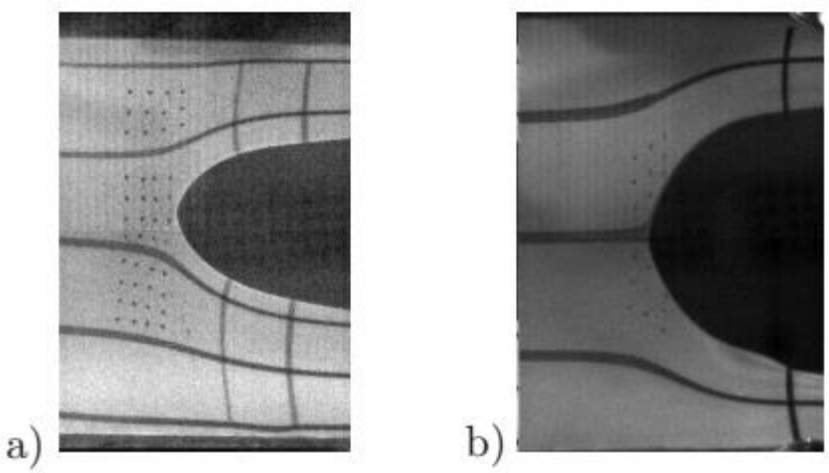
Bu proje kapsamında gerçekleştirilen çalışmada Miehe ve Schanzel tarafından geliştirilen kuramda kullanılan bünye modeli mikro-küre modeli ile değiştirilerek özellikle çatlak ucundaki deformasyon dağılımı ve de gerilim dağılımı iyileştirilmiştir. Önümüzdeki dönem içerisinde bu kuramın eksikleri; (i) enerji kriterinin eşik enerji değerine ulaşana dek degradasyon engellenerek ve (ii) gevrek ve sünek yırtılma mekanizmalarını kontrol edebileceğimiz degradasyon fonksiyonu ile kuramın eksik noktaları eniyilenmiştir.

3.1.2 Elastik Yırtılma için Sayısal Çalışmaların Özeti

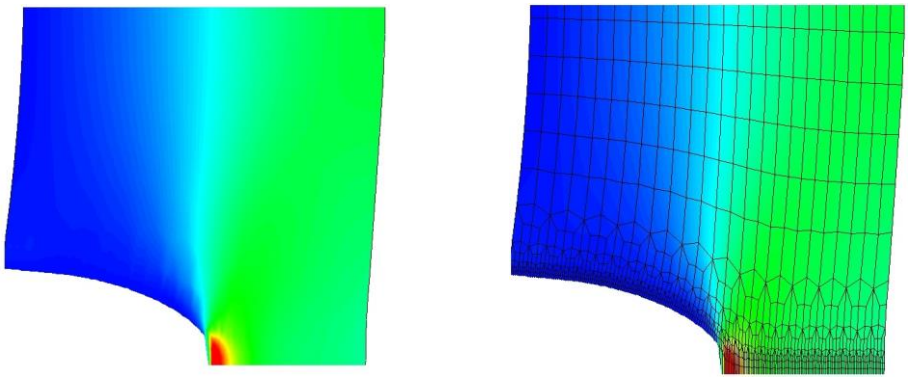
Bu bölümde raporun bir önceki alt başlığında kısaca özetlenen elastik yırtılma kuramının sayısal olarak sonlu elemanlar yöntemi ile açık kaynak kodlu FEAP yazılımına aktarılması sonrası elde edilen sonuçların kısa bir özeti irdelenecektir. Öncelikle, içinde çatlak barındıran düzlemsel bir kauçuk numunesinde çatlak ucununun görseli **Şekil 8**'de görülmektedir. Treloar verisinden elde edilen malzeme parametreleri ile mikro-küre modeli kullanılarak elde edilen sonlu elemanlar benzetimi sonucunda elde edilen çatlak ilerleme anına ait görüntü **Şekil 9**'da görülmektedir. Elde edilen sonuç ile **Şekil 8**'de verilen görüntü karşılaştırıldığında kalitatif olarak çatlak ucundaki deformasyon dağılımının gerçekçi olarak modellenebildiği görülmektedir.

İkinci bir çalışma, Miehe ve Schanzel tarafından yürütülen çalışma ile bu proje kapsamında geliştirilen mikro-küre modeline dayalı faz-alanı yaygın çatlak modelinin mikro-küre model parametrelerinin basitleştirilerek neo-Hooke modelinin elde edilmesi sonucu basitleştirilen modelin karşılaştırılması ile geliştirilen sayısal algoritmaların doğrulanması amacıyla

yürütülmüştür. Bu kapsamda **Şekil 8**'de verilen numune alt yüzeyden sabitlenip üst yüzeyden eş-deplasman uygulanarak deforme edilmiştir. Çatlak ilerlemeye başladığı anda **Şekil 9**'da gerilim ve faz alanı parametresi (hasar parametresi) d'nin çatlak etrafında yakınlaştırılmış görüntüsü verilmektedir.

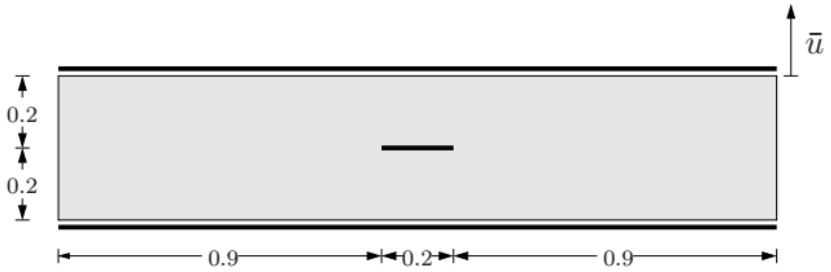


Şekil 8. Kauçuk türü malzemelerde düzlemsel bir numunede çatlak ucunun farklı yükleme düzeylerinde görünümü. Kaynak: http://chaos.utexas.edu/people/faculty/michael-p-marder/fracture-of-rubber

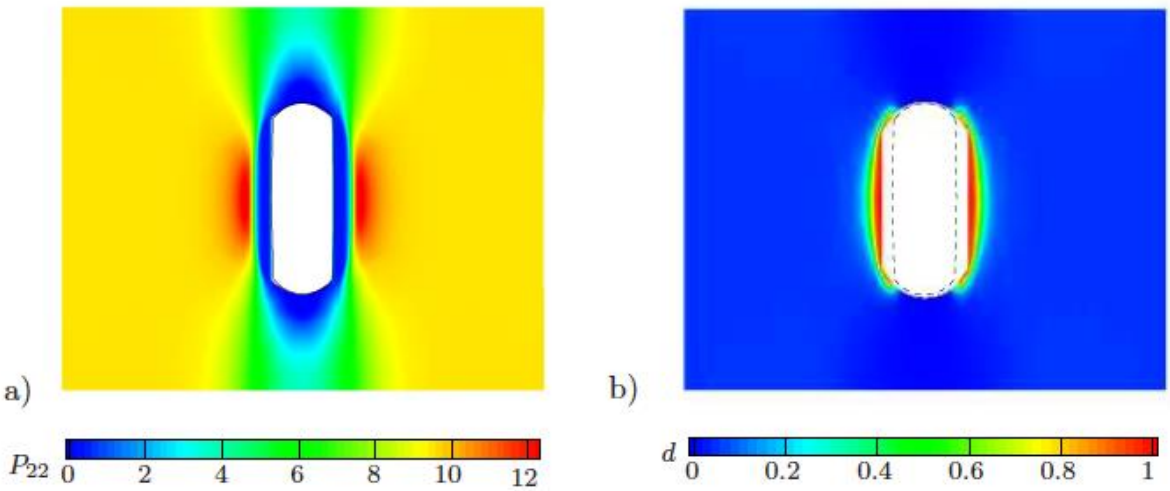


Şekil 9. Kauçuk türü malzemelerde düzlemsel bir numunede çatlak ucunun çatlak ilerleme anında anlık görüntüsünün ağsız ve sonlu elemanlar ağı ile görüntülenmesi. Hasar parametresinin d>0.99 oldugu bölgeler karatılarak çatlak görüntülenmiştir.

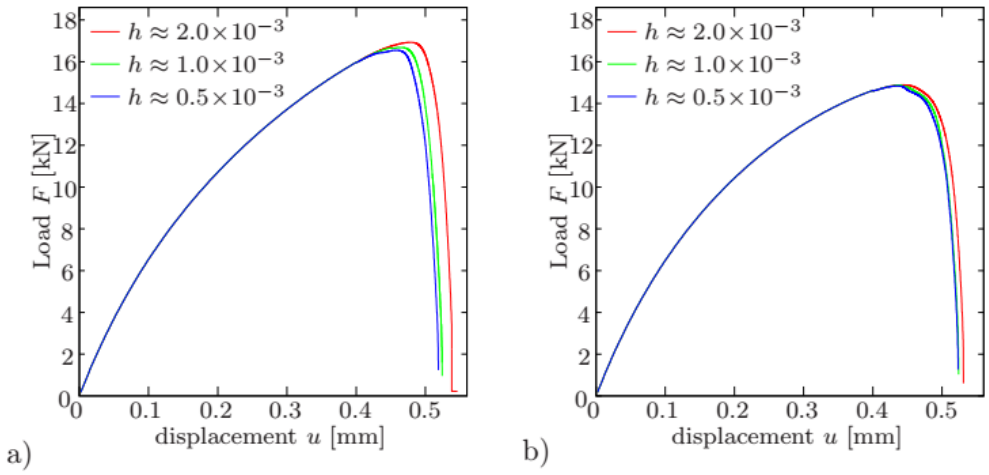
Yük deplasman eğrilerinin ağ yoğunluğuna bağlı olarak değişimi ise **Şekil 12**'da verilmiştir. Elde ettiğimiz yük-deplasman eğrileri Miehe ve Schanzel tarafından verilen sonuçlarla örtüşmektedir. Özellikle eleman boyutu 2h<l koşulu sağlandığı takdirde elde edilen sonuçların ağ yoğunluğundan bağımsız hale geldiği görülmektedir.



Şekil 10. Kuruş şeklindeki çatlak içeren iki boyutlu düzlemsel test numunesinin geometrik şekli ve yükleme ve sınır değer koşulları. Numune alt yüzeyden sabitlenip üst yüzeyde deplasman uygulanarak yüklenmektedir.



Şekil 11. Şekil 10'da verilen numunenede çatlak başlangıcı anında (a): 1. Piola-Kirchhoff gerilim tensorünün düşey komponenti (b) faz alanı hasar parametresinin çatlak başlama anında dağılımı.



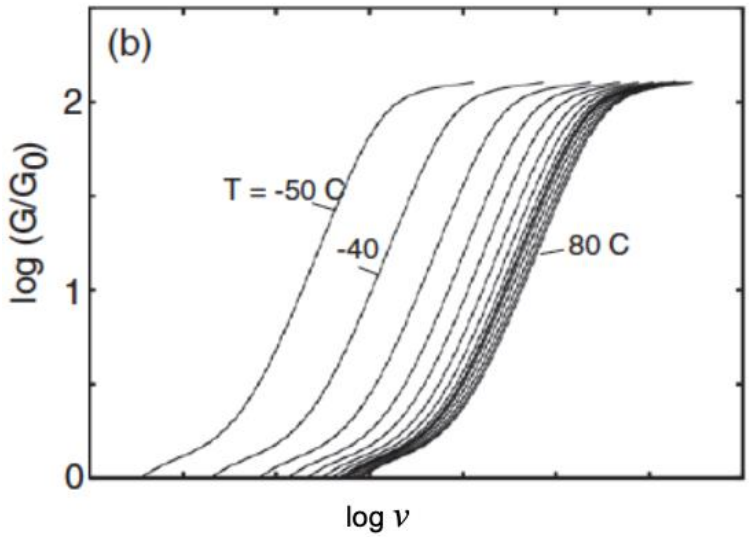
Şekil 12. Şekil 10'da verilen numunenin 5000, 15000 ve 45000 elemanla yapılan benzetimlerin yük deplasman eğrilerin (a) l=0.01mm ve (b) l=0.02mm ölçek boyutu parametresine bağlı olarak grafik gösterimi.

3.2 ViskoelastikYırtılma için Kuramsal Çalışmalar

Viskoleastik davranış, kauçuk türü malzemelerde enerji bırakma nispetinin çatlak ilerleme hızının bir fonkisyonu şeklinde ifade edilmesine yol açar. Kırılgına veya gevrek malzemelerde bu durum gözlemlenmez. Literatürde enerji bırakma nispeti (energy release rate = tearing energy) veya kauçuk komitesince kullanılan adıyla yırtılma enerjisi

$$G(v,t) = G_0(1 + f(v,t))$$

Şeklinde ifade edilir. G_0 herhangi bir yırtılmanın oluşmadığı eşik değer olarak kabul edilir. Yırtılma ener



Şekil 13: Yırtılma enerjisinin çatlak ilerleme hızına bağlı olması. Çizim SBR kauçuğu için elde edilmiştir, bknz Persson ve ark. [67].

Kauçuğun yırtılma enerjisinin hıza bağlı olması uzun zamandır bilinen bir gerçek, bakınız Perrson ve ark [67]. **Şekil 13**'de gözlemlenen yırtılma enerjisinin çatlak hızına bağlı olarak gösterdiği değişim ancak kauçuğun tüm viskoelastik spektrumunun modellenmesiyle mümkün olabilmektedir. Bu durum şu an için hesaplama kapasitemizin üstünde olacağında viskoelastik etkiyi istenen bir yükleme hızı aralığında kalitatif olarak yakalayabilen tek bir Maxwell elemanından oluşan basit viskoelastik model üzerinde çalışacağız. Elde edilen sonuçların genelleştirilmiş Maxwell modeline aktarılması sadece basit bir kod döngüsü ile elde edilebilir.

3.2.1 Genelleştirilmiş sıkıştırılabilir neo-Hooke model ve 8-zincir modeli

Genelleştirilmiş sıkıştırılabilir neo-Hooke modeli aşağıdaki gibi gösterilebilir,

$$\Psi^e(J, I_1) = \frac{\lambda}{2}(\ln J)^2 + \frac{\mu}{2}(I_1 - 2\ln J).$$

Burada $\lambda = \kappa - \frac{2}{3}\mu$ ve μ Lamé katsayılarıdır. Sıkıştırılabilir neo-Hooke bir malzeme için Kirchhoff ve Cauchy gerilim değerleri aşağıdaki gibi elde edilebilir,

$$\boldsymbol{\tau}^e = (\lambda(\ln J) - \mu)\mathbf{1} + \mu\boldsymbol{b}\,, \qquad \sigma^e = \frac{1}{J}(\lambda(\ln J) - \mu)\mathbf{1} + \frac{\mu}{J}\boldsymbol{b}.$$

Deforme olmamış durum için $\boldsymbol{b} = \mathbf{1}$ yukarıdaki verilen eşitlikler normalizasyon koşullarını sağlamaktadır,

$$\Psi^e(J = 1, I_1 = 3) = 0\,, \qquad \boldsymbol{\tau}^e(J = 1, I_1 = 3) = \mathbf{0}.$$

Hacimsel 8-zincir modeline genişlettiğimizde,

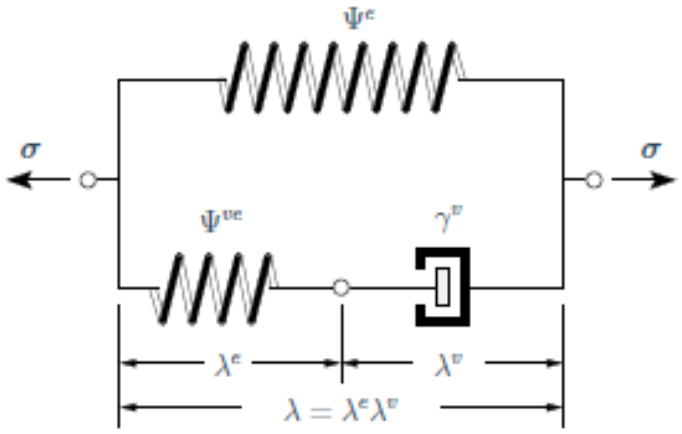
$$\Psi^e(J, I_1) = \frac{\lambda}{2}(\ln J)^2 - \frac{\mu 3N - 1}{3N - 1}(lnJ) + \mu N\left(\lambda_r \mathcal{L}^{-1}(\lambda_r) + ln\frac{\mathcal{L}^{-1}(\lambda_r)}{\sinh\mathcal{L}^{-1}(\lambda_r)}\right).$$

Elde edilir. Bu özgül enerji fonksiyonu için gerilim değerleri,

$$\boldsymbol{\tau}^e = (\lambda(lnJ) - \tilde{\mu})\mathbf{1} + \hat{\mu}\boldsymbol{b}\,, \boldsymbol{\sigma}^e = \frac{1}{J}(\lambda(lnJ) - \tilde{\mu})\mathbf{1} + \frac{\hat{\mu}}{J}\boldsymbol{b}$$

şeklindedir. Burada $\tilde{\mu} = \frac{\mu^v 3N^v - 1}{3N^v - 1}$ ve $\hat{\mu} = \frac{\mu^v 3N^v - \lambda^2}{3N^v - \lambda^2}$ olur. Eğer $N \to \infty$, $\hat{\mu} \to \mu$ ve $\tilde{\mu} \to \mu$ olursa neo-Hooke modeli elde edilir.

3.2.2 Hacimsel etkileri içeren yeni sonlu viskoelastik model

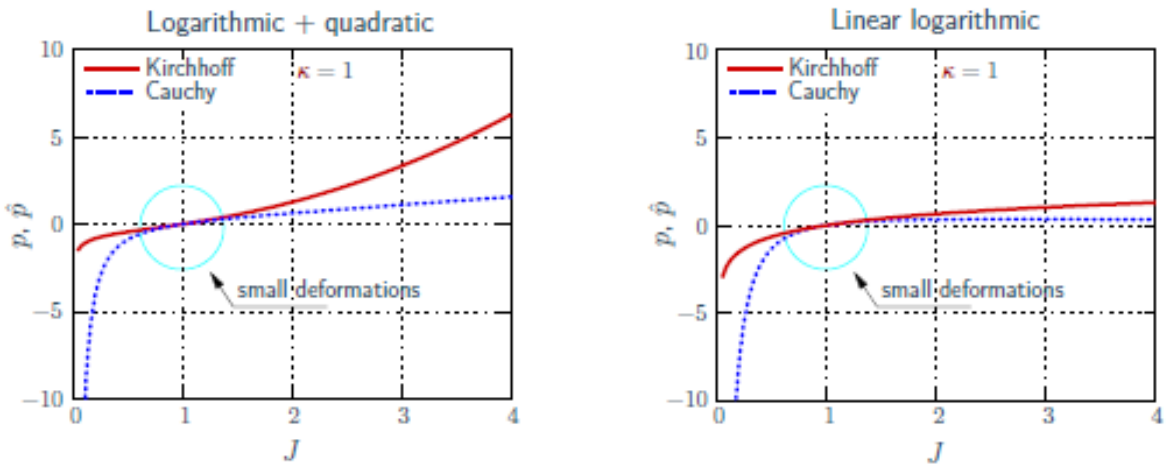


Şekil 14: Önerilen standart viskoelastik katı reolojisi (Maxwell gösterimi)

<u>Özgül enerji fonksiyonu:</u>
Yukarıda verilen standart viskoelastik katı reolojisi (bakınız **Şekil 14**) ile uyumlu özgül enerji fonksiyonu toplamsal olarak ayrıştırılarak elastik ve viskoz kısımlar cinsinden,

$$\Psi = \Psi^e(\boldsymbol{F}) + \Psi^{ve}(\boldsymbol{F}^e)$$

şeklinde yazılabilir.



Şekil 15:. Lineer logaritmik ve logaritmik+kuadratik formülasyonla elde edilmiş Kirchhoff ve Cauchy gerilimlerinin davranışı.

<u>Kinematik:</u>
Deformasyon gradyantının elastik ve viskoz kısımlara ayrıştırılması, yani

$$\boldsymbol{F} = \boldsymbol{F}^e \boldsymbol{F}^{ve}$$

ile kinematik bağıntılar elde edilebilmektedir. Özgül enerji fonksiyonunun içinde bulunan değişmezlerden hacimsel değişmez, $J = det\boldsymbol{F}, J^e = det\boldsymbol{F}^e, J^{ve} = det\boldsymbol{F}^{ve}$ olarak ifade edilebilir ve $J = J^e J^{ve}$ şeklinde ayrışımı mümkündür. İlk değişmez, $I_1 = tr\boldsymbol{C}$, $I_1^e = tr\boldsymbol{C}^e$ şeklinde olup burada $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{F}^T\boldsymbol{F}$ ve $\boldsymbol{C}^e = \boldsymbol{F}^{eT}\boldsymbol{F}^e$ olarak tanımlanmaktadır. Bu tanımlarla birlikte özgül enerjinin genelleştirilmiş hali

$$\Psi = \Psi^e(J, I_1) + \Psi^{ve}(J^e, I_1^e)$$

olarak yazılabilmektedir.

3.2.3 Genelleştirilmiş sıkıştırılabilir neo-Hooke ve 8-zincir modeli

Burada kuadratik (hacimsel olarak) sıkıştırılabilir neo-Hooke modeli ($\lambda = \kappa - \frac{2}{3}\mu$) aşağıdaki bakış açısı ile,

$$\Psi^e(J, I_1) = \frac{\lambda}{4}[(lnJ)^2 + (J-1)^2] + \frac{\mu}{2}(I_1 - 2lnJ)$$

tarafımızca önerilmiştir. Bağıntıdaki $(J-1)^2$, pozitif hacimsel değişim durumunda Cauchy-tipi basıncın monoton büyümesini garanti etmektedir. Benzer şekilde, viskoz davranış aynı fonksiyonel formatta ele alındığında,

$$\Psi^{ve}(J^e, I_1^e) = \frac{\lambda}{4}[(lnJ^e)^2 + (J^e-1)^2] + \frac{\mu}{2}(I_1^e - 2lnJ^e)$$

özgül enerji yapısı yazılabilmektedir. Sıkıştırılabilir sekiz-zincir modelinin özgül enerji fonksiyonunun kuadratik genişletilmiş hali için aşağıdaki formu yazabiliriz,

$$\Psi^e(J, I_1) = \frac{\lambda}{4}[(lnJ)^2 + (J-1)^2] - \frac{\mu 3N - 1}{3N-1}(lnJ) + \mu N\left(\lambda_r \mathcal{L}^{-1}(\lambda_r) + ln\frac{\mathcal{L}^{-1}(\lambda_r)}{sinh\mathcal{L}^{-1}(\lambda_r)}\right).$$

Burada $\lambda^v = \kappa^v - \frac{2}{3}\mu^v$ ve μ^v Lamé sabitleridir. Sıkıştırılabilir 8-zincir malzeme için Kirchhoff ve Cauchy gerilim formülleri sırasıyla aşağıdaki gibi elde edilebilir,

$$\boldsymbol{\tau}^{ve} = (\lambda^v(lnJ^e) - \mu^v)\mathbf{1} + \mu^v \boldsymbol{b}^e\,, \qquad \boldsymbol{\sigma}^{ve} = \frac{1}{J}(\lambda^v(lnJ^e) - \mu^v)1 + \frac{\mu^v}{J}\boldsymbol{b}^e.$$

Hacimsel sekiz-zincir modeline genişlettiğimizde,

$$\Psi^{ve}(J^e, I_1^e) = \frac{\lambda^v}{2}(lnJ^e)^2 - \frac{\mu^v 3N^v - 1}{3N^v - 1}(lnJ^e) + \mu^v N^v\left(\lambda_r^e \mathcal{L}^{-1}(\lambda_r^e) + ln\frac{\mathcal{L}^{-1}(\lambda_r^e)}{sinh\mathcal{L}^{-1}(\lambda_r^e)}\right)$$

olacaktır. Özgül enerji fonksiyonunda $\lambda_r^e = \frac{\lambda^e}{\sqrt{N^v}}$ ve $\lambda^e = \sqrt{\frac{I_1^e}{3}}$ tanımları kullanılmıştır. Sıkıştırılabilir sekiz-zincir modelinin gerilim bağıntısı,

$$\boldsymbol{\tau}^{ve} = (\lambda^v(lnJ^e) - \tilde{\mu})\mathbf{1} + \hat{\mu}\boldsymbol{b}^e$$

olarak yazılabilmektedir, burada $\tilde{\mu} = \frac{\mu^v 3N^v - 1}{3N^v - 1}$ ve $\hat{\mu} = \frac{\mu^v 3N^v - \lambda^2}{3N^v - \lambda^2}$ şeklindedir.

Sıkıştırılabilir neo-Hooke malzemenin kuadratik versiyonu için Kirchhoff ve Cauchy gerilimleri aşağıdaki gibi verilebilir

$$\boldsymbol{\tau}^{ve} = \left[\frac{\lambda^v}{2}(\ln J^e + J^e(J^e - 1)) - \mu^v\right]\mathbf{1} + \mu^v \boldsymbol{b}^e, \qquad \boldsymbol{\sigma}^{ve} = \frac{1}{J}\boldsymbol{\tau}^{ve}$$

Hacimsel sekiz-zincir modeline genişlettiğimizde ise,

$$\Psi^{ve}(J^e, I_1^e) = \frac{\lambda^v}{2}[(\ln J^e)^2 + J^e(J^e-1)^2] - \frac{\mu^v 3N^v - 1}{3N^v - 1}(\ln J^e) + \mu^v N^v\left(\lambda_r^e \mathcal{L}^{-1}(\lambda_r^e) + ln\frac{\mathcal{L}^{-1}(\lambda_r^e)}{sinh\mathcal{L}^{-1}(\lambda_r^e)}\right)$$

burada $\lambda_r^e = \frac{\lambda^e}{\sqrt{N^v}}$ ve $\lambda^e = \sqrt{\frac{I_1^e}{3}}$ şeklindedir.

Böylelikle, sıkıştırılabilir sekiz-zincir modelinin gerilim bağıntısı,

$$\tau^{ve} = \left(\frac{\lambda^{ve}}{2}(lnJ^e + J^e(J^e-1)) - \tilde{\mu}\right)\mathbf{1} + \hat{\mu}\boldsymbol{b}^e$$

olarak yazılabilir. Burada $\tilde{\mu} = \frac{\mu^v 3N - 1}{3N^v - 1}$ ve $\hat{\mu} = \frac{\mu^v 3N^v - \lambda^2}{3N^v - \lambda^2}$ dir.

Bu çıkarımlar ışığında, şimdi ise uzamsal hız gradyantı ve simetrik deformasyonun hızı tensörlerini ele alalım,

$$\boldsymbol{l} := \dot{\boldsymbol{F}}\boldsymbol{F}^{-1}, \qquad \boldsymbol{d} := sym(\boldsymbol{l}).$$

Uzamsal hız gradyantı elastik ve elastik olmayan kısımlara aşağıdaki gibi ayrıştırılabilir,

$$\boldsymbol{l} = \boldsymbol{l}_e + \boldsymbol{F}^e \boldsymbol{l}_i \boldsymbol{F}^{e-1} = \boldsymbol{l}_e + \tilde{\boldsymbol{l}}_i.$$

Böylelikle, Clasius-Planck eşitsizliğini aşağıdaki formda yazabiliriz,

$$\mathcal{D} = \boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{d} - \dot{\Psi} \geq 0$$

bu bağıntıda,

$$
\begin{aligned}
\dot{\Psi} &= 2\partial_{\boldsymbol{C}}\Psi^e : \left[\boldsymbol{F}^T \boldsymbol{d}^{iso} \boldsymbol{F}\right] + 2\partial_{\boldsymbol{C}_e}\Psi^v : [\boldsymbol{F}^{eT} \boldsymbol{d}_e \boldsymbol{F}^e] \\
&= \boldsymbol{F}[2\partial_{\boldsymbol{C}}\Psi^e]\boldsymbol{F}^T : \boldsymbol{d}^{iso} + \boldsymbol{F}^e\left[2\partial_{\boldsymbol{C}_e}\Psi^v\right]\boldsymbol{F}^{eT} : \boldsymbol{d}_e \\
&= \boldsymbol{\tau}^e : \boldsymbol{d} + \boldsymbol{\tau}^v : \boldsymbol{d}_c \\
&= \boldsymbol{\tau}^e : \boldsymbol{d} + \boldsymbol{\tau}^v : \left[\boldsymbol{d} - \widetilde{\boldsymbol{d}}_i\right] \\
&= [\boldsymbol{\tau}^e + \boldsymbol{\tau}] : \boldsymbol{d} - \boldsymbol{\tau}^v : \widetilde{\boldsymbol{d}}_i
\end{aligned}
$$

sadeleştirmelerinin ardından sönümleme eşitsizliği,

$$\mathcal{D} = \boldsymbol{\tau} : \widetilde{\boldsymbol{d}}_i \geq 0$$

elde edilir. Evrilme eşitliği inelastik deformasyonun hızı tensörü $\widetilde{\boldsymbol{d}}_i$ için bünye denklemini tanımlamaktadır. Bu eşitsizliğin koşulsuz olarak sağlanması termodinamiğin 2. yasasının malzeme modeli tarafından ihlal edilmediğini garanti eder.
Hacimsel ve kesme deformasyonları için ayrık rahatlama kinetiğine izin vermesi için dördüncü dereceden bir hususi tensör tanımlarsak,

$$\widetilde{\boldsymbol{d}}_i = \mathbb{E} : \boldsymbol{N}$$

burada,

$$\mathbb{E} := \dot{\gamma}\mathbb{I}$$

şeklindedir. Bu tanımlarla beraber inelastik deformasyonun hızı tensörü $\widetilde{\boldsymbol{d}}_i$,

$$\tilde{d}_i := \dot{\gamma}\boldsymbol{N}$$

olarak elde edilir. İfadedeki $\boldsymbol{N}$, viskoz Kirchhoff gerilim tensörünün yönünü ifade etmektedir ve $\boldsymbol{N} = \frac{\boldsymbol{\tau}^v}{\|\boldsymbol{\tau}^v\|}$ olarak tanımlanır.
Bu basitleştirilmiş versiyon için kullanılan varsayım esasında şekilsel ve hacimsel rahatlamanın mekanizmasının aşağıda verilen aynı kinetik eşitlik tarafından yönlendirildiğidir.

$$\tilde{d}_i = \dot{\gamma}(\tau_v)\boldsymbol{N},$$

ifadesinde $\tau_v := \|dev\boldsymbol{\tau}^v\|\sqrt{2}$ olarak tanımlanmıştır.

3.2.4 Yeni evrilme eşitliği

Engeller arasında kalan polimer zincirinin uzunluğu artarak en uygun durum olan $r = \sqrt{N_\infty}\hat{l}$ değerine yönelmektedir. Tamamıyla rahatlamış durum için boğum sayısı,

$$N_\infty = \bar{\lambda}^2 N_0$$

olacaktır. Burada $\bar{\lambda} = \frac{r}{r_0}$'dur. Seri deformasyon ve tamamıyla rahatlamış durum arasında bir adımı ele alalım. Yüklemenin kaldırıldığı durumda olasılıksal olarak en çok tercih edilen uçtan-uca bir uzunluk olan $\bar{r}(t) = \sqrt{N(t)}\hat{l}$ tanımlayalım. Deformasyon nedeniyle oluşan bir durum için, $\bar{\lambda}$ aşağıda verilmiştir ve elastik ve elastik olmayan kısımlara ayrıştırılabilir,

$$\bar{\lambda} = \frac{r}{r_0} = \frac{r}{\bar{r}(t)}\frac{\bar{r}(t)}{r_0} = \lambda_e(t)\lambda_v(t).$$

Başlangıçta, uçtan-uca uzunluk $\bar{r}(0) = r_0$, $\lambda_e(0) = \bar{\lambda}$ ve $\lambda_v(0) = 1$ değerlerini almaktadır. Tamamıyla rahatlamış durum için, uçtan-uca uzunluk $\bar{r}(t = t_\infty) = r$ ve bu da $\lambda_v(t = t_\infty) = \bar{\lambda}$. İki engel arasında zincir uzunluğunun evrimi için şu bağıntı kullanılabilir,

$$\dot{N}(t) = \frac{1}{\tau}[N_\infty - N(t)].$$

Burada τ rahatlama zamanı olarak tanımlanmıştır. ADD (âdi diferansiyel denklem)'in sonucu,

$$N(t) = (N_\infty - N(t))\left[1 - exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)\right] + N_0$$

olmaktadır. Viskoz uzama λ_v'nın hızı alındığında ve bağıntıda yerine konulduğunda,

$$\dot{\lambda}_v = \frac{\dot{\bar{r}}(t)}{r_0} = \frac{1}{2\tau}\ 1/\sqrt{N(t)N_0}\left[\frac{N_\infty}{\sqrt{N(t)}} - \sqrt{N(t)}\right]$$

bulunur. Eşitlikte $\lambda_e = \frac{\sqrt{N_\infty}}{\sqrt{N(t)}}$ ve $\sqrt{N_\infty} = \bar{\lambda}\sqrt{N_0}$ yerlerine yazıldığında,

$$\dot{\lambda}_v = \frac{1}{2\tau}\bar{\lambda}\left[\lambda_e - \frac{1}{\lambda_e}\right]$$

şeklindeki hız eşitliğini buluruz. Euler karşılığında büyük-esneme kinematiği ile uyumlu olabilmek için, tek-boyutlu logaritmik eşini tanımlamak gerekir,

$$\dot{\epsilon}_v = \frac{\dot{\lambda}_v}{\lambda_v} = \dot{\gamma}_0[\lambda_e^2 - 1].$$

Krip-sünme hızının enerji aktivasyon etkisini göz önüne aldığımızda krip-sünme bağıntısına ek bir terim gelmektedir. Tek zincir için olan λ_e bağıntısı 8-zincir modelinin λ_n^e'si ile değiştirildiğinde aşağıdaki krip hızı

$$\dot{\gamma} := \dot{\gamma}_0\left[\lambda_n^{e\,2} - 1\right]\left(\frac{\tau_v}{\hat{\tau}}\right)^m$$

olarak bulunur. Yukarıda verilen krip denklemi mikro-küre modeline p=2 alınarak eklenmiştir. Böylelikle reolojideki ilk yay (bknz. Şekil 13) mikro-küre modeli ile, ikinci yay ise Arruda-Boyce'un sekiz-zincir modeline indirgenerek modellenmiştir. Bunun nedeni, viskositeye neden olan ikincil ağın serbest zincirlerden oluşması ve bu nedenle birbiriyle sıkı sıkıya bağlı bir ağ (network) oluşturmaması nedeniyle kompleks bir malzeme modeli ile modellenmesinin gerekmemesinden kaynaklanmaktadır.

3.2.5 Yeni Yırtılma Kriteri

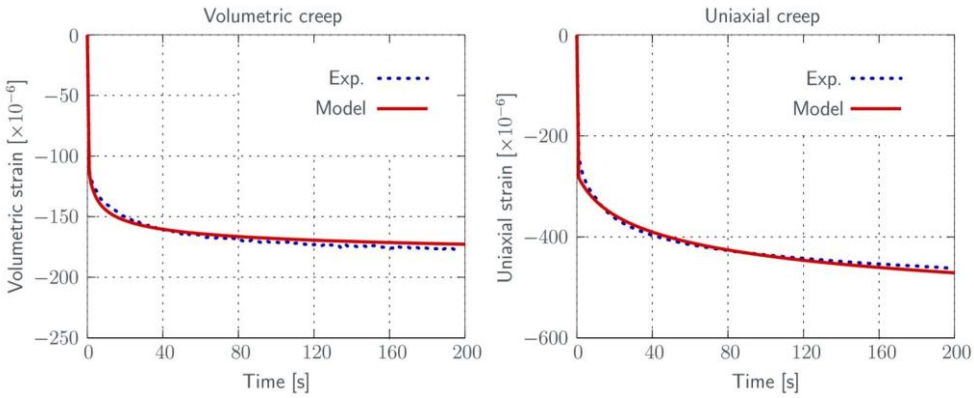
Bölüm 3.1'de elastik yırtılma kuramında sunulan faz alanı yaygın çatlak modelindeki çatlak büyüme fonksiyonu iki farklı bağıntı ile irdelenmiştir:

Kriter 1: $$\mathcal{H} = \langle \frac{\Psi_0^e}{g_c^e/l} - 1.0 \rangle$$

Kriter 2: $$\mathcal{H} = \langle \frac{\Psi_0^e}{g_c^e/l} + \frac{\Psi_0^v}{g_c^v/l} - 1.0 \rangle$$

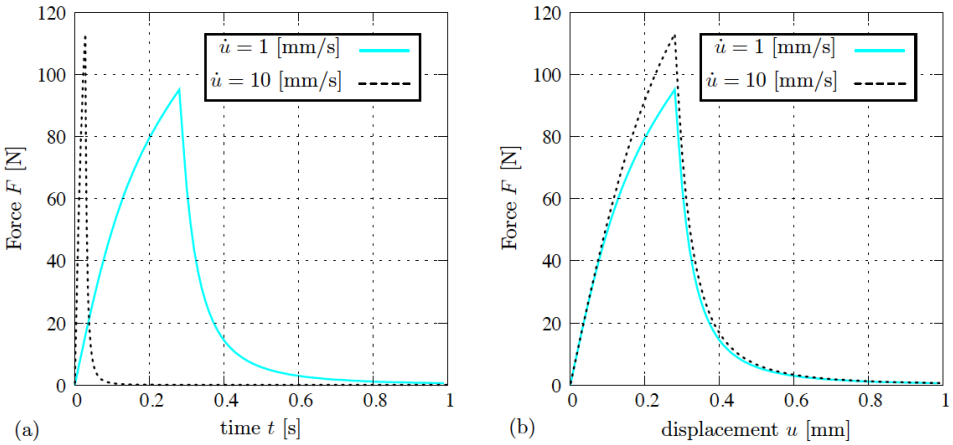
Birinci bağıntıda çatlağı ilerleten itici gücün (crack driving force) sadece elastik enerji olduğu, ve viscos etkilerin çatlak ilerlerken çatlak etki alanında (crack process zone) oluşan enerji bariyerinin dolaylı olarak yarattığı dirençten olduğu kabul edilmiştir. İkinci bağıntıda ise toplam enerji eşiği elastik ve inelastik deformasyonların farklı eşik değerlerle toplamının kritik değere ulaşması sonucu çatlağın ilerlediğini önermektedir. Her iki kriter ile elde edilen sonuçlar Bölüm 3.2.6'da karşılaştırılacaktır.

3.2.6 Parametre Belirleme ve Farklı Yükleme Hızları Altında Çatlak Oluşumu

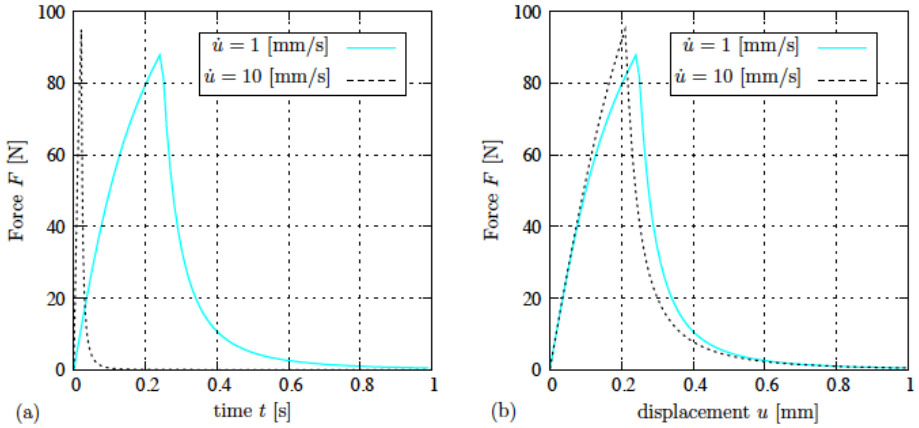


Şekil 16: Önerilen sonlu viskoelastisite modelinin cam geçişkenlik sıcaklığı üzerinde kauçuk davranışı sergileyen epoksi malzemenin krip-sünme deney sonuçları ile doğrulanması. Deney sonuçları Maryland Üniversitesi'nden Prof. Dr. Bongtae Han tarafından temin edilmiştir.

Bölüm 3.2.3-3.2.5'de verilen viskoelastik bünye modeli BOSCH GmbH tarafından sağlanan krip-sünme deney sonuçları ile doğrulanmıştır. Bu sonuçlar Maryland Üniversitesi'nden Prof. Dr. Bongtae Han tarafından elde edilmiştir ve yakın zamanda yürüttüğümüz sonlu viskoelastisite modeli geliştirme projesi kapsamında yayınlanacaktır. Bu parametreler çalışmalarımızda gerçekçi krip parametreleri ile kalitatif sonuçlar elde etmek adına kullanılmıştır. Termoset polimer kategorisine giren epoksi polimerin Cam geçiş sıcaklığı (110-120°C) üzerinde kauçuk türü davranış sergilediği bilinmektedir.



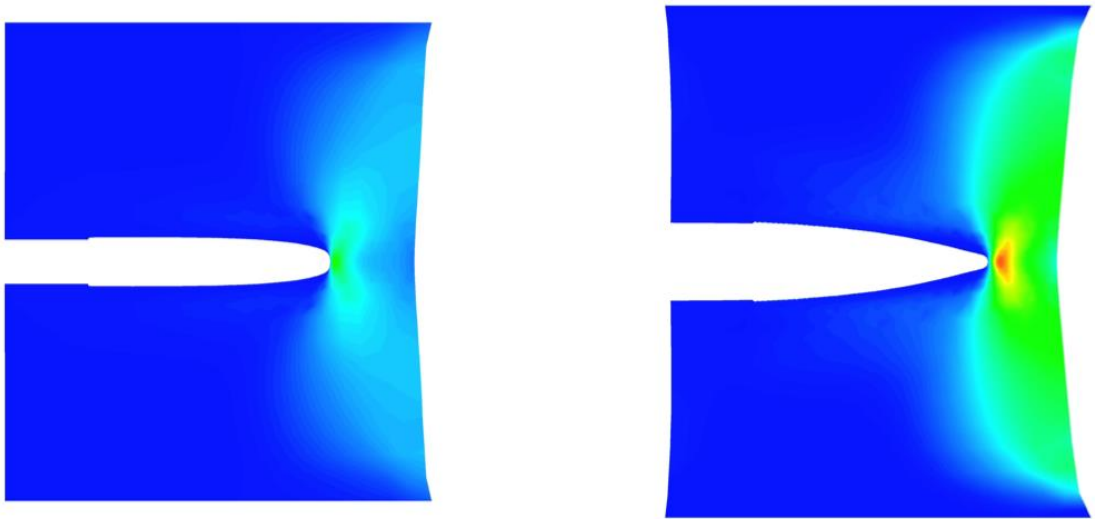
Şekil 17: Kriter 1: Düşük ve yüksek yükleme hızlarında tek eksenli çekme deneyi esnasında çatlak noktasında oluşan (a) Kuvvet-zaman (b) Kuvvet-deplasman eğrisi



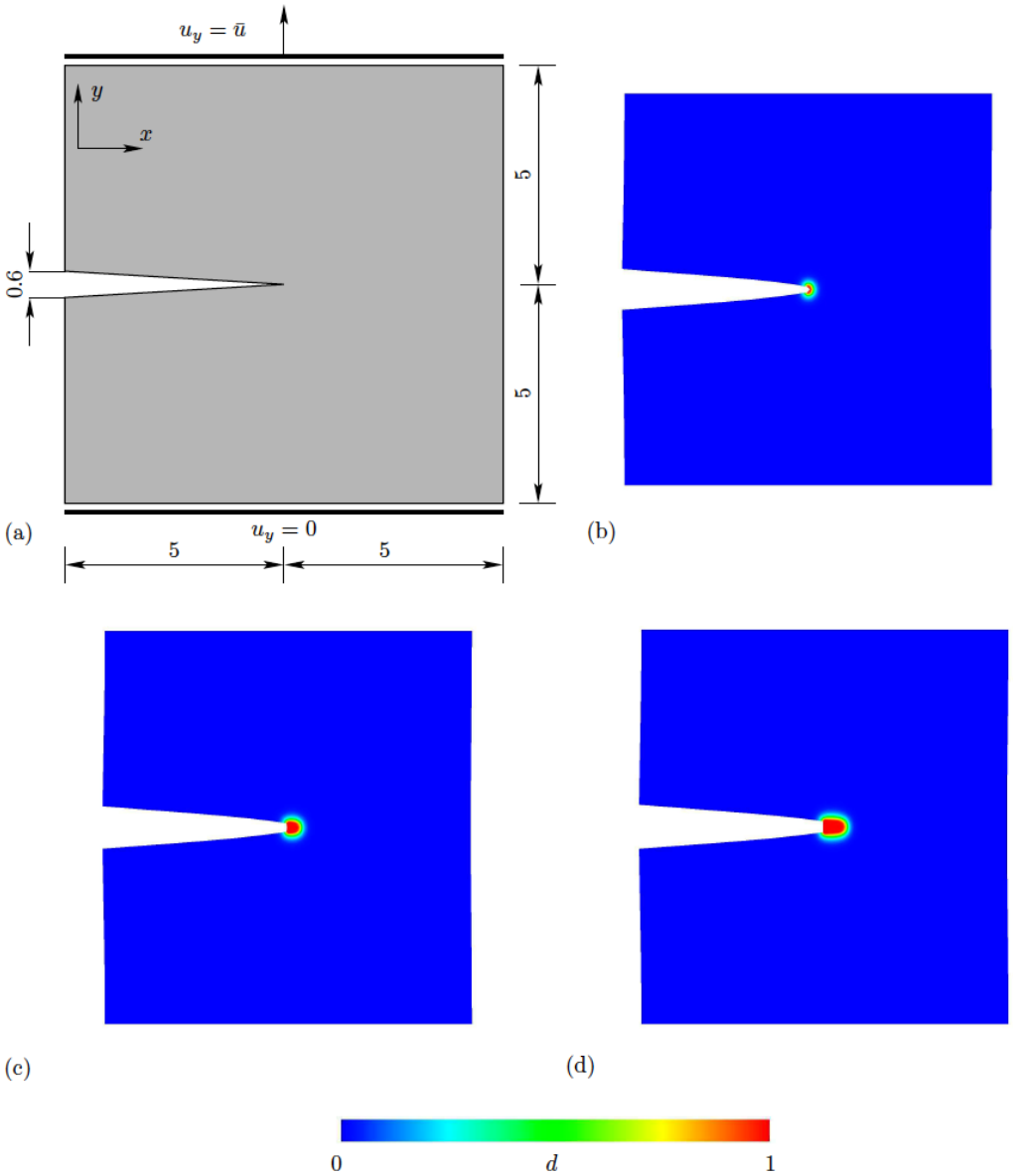
Şekil 18 Kriter 2: Düşük ve yüksek yükleme hızlarında tek eksenli çekme deneyi esnasında çatlak noktasında oluşan (a) Kuvvet-zaman (b) Kuvvet-deplasman eğrisi

Önerilen evrim denkleminin kantitatif sonuç verip vermediğinin kontrol edilmesi amacıyla işbirliği içinde olduğumuz BOSCH GmbH firması araştırma grubumuza hacimsel ve tek eksenli krip-sünme deney sonuçlarını paylaşmayı kabul etmiştir. Yaptığımız parametre berlileme çalışmaları gayet iyimser sonuçlar vermiştir. Tek elemanlı birim boyutlarda (1mm x 1mm x 1mm) bir küp elemanının tek eksenli iki farklı hızda çekilmesi sonucunda elde edilen kuvvet-zaman ve kuvvet-deplasman eğrileri **Şekil 17-18**'de gösterilmektedir. **Şekil 17**, Kriter 1 kullanılarak elde edilen sonuçları göstermektedir. Bu benzetim, gerçeğe yakın fakat deneysel sonuçlardan elde edilmemiş malzeme parametreleriyle elde edilmiştir. Enerji kriteri değiştirilerek Kriter 2 ile gerçekleştirilen benzetimlerde eşik gerilmenin aynı elastik enerji eşiğinde dahi Kriter 1'e oranla daha düşük gerilim eşiği verdiği gözlemlenmektedir, bakınız **Şekil 18**. Üç boyutlu tek çentikli ince bir kauçuk numunenin mod 1'de (Mode 1 crack) alt yüzeyde tutularak üst yüzeyden deplasman kontrolü altında *v*=0.001mm/s ve *v*=10mm/s hızlarda çekilmesi sonucunda viskoleastik etkinin çatlak tipindeki gerilim dağılımını ve çatlak profilini nasıl etkilediği **Şekil 19**'da verilmiştir.

Gerek yük desplasman eğrisi gerekse çatlak profilinin viskoz etkiler tarafından güçlü bir şekilde etkilendiği standart viskoelastik katı model reolojisinde dahi gözlemlenmiştir. Mevcut çalışmanın eniyilemesi yapılarak en kısa zamanda yayına hazır hale getirilecektir. Şekil 19'da faz alanı parametresi 0.99'dan büyük olduğu bölümler karartılarak çatlak ucu gösterilmektedir. **Şekil 20**'de V-tipi bir çatlakta çatlak başlangıcı d-hasar parametresi gösterilerek çatlak başlangıcı ve ilerlemesi gösterilmektedir. Elastik çatlağa oranla, viskoleastik etkiler, yüksek hızlarda çatlak ucunun daha keskin olmasına neden olmaktadır.



Şekil 19: Kriter 2: v=0.001mm/s (sol) ve v=10mm/s (sağ) hızlarda çekilen numunenin iki farklı hızda gösterdiği çatlak ilerlemesi



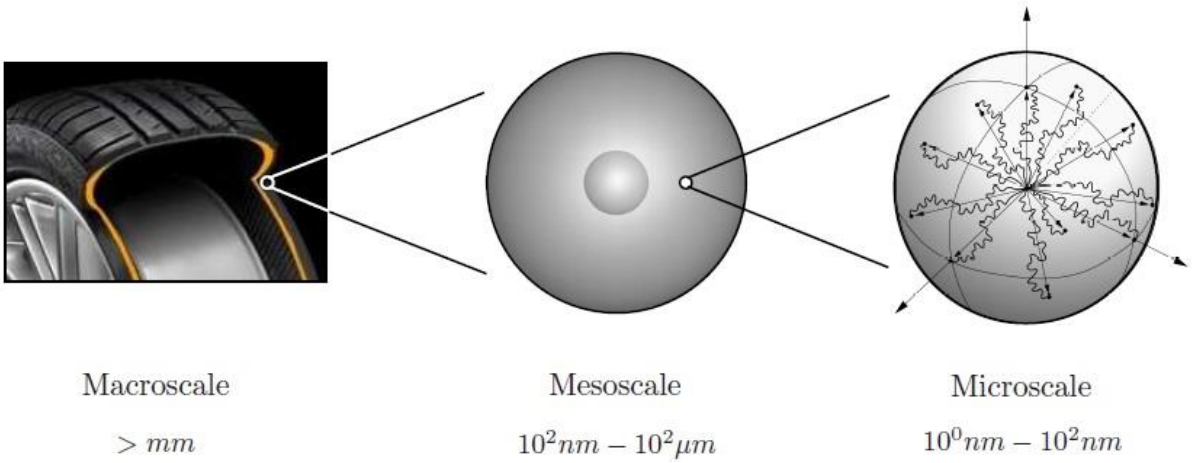
Şekil 20: Viskoelastik çatlak ilerlemesi: V-tipi çatlakta hasar parametresinin çatlak oluşumu ve ilerleme başlangıcındaki görünümü

3.3 Kavitasyon oluşumu ve kavitasyon büyümesi için çok-ölçekli bünye denklemi

Doğru ve fiziksel tabana dayanan bir süreklilik hasar modeli boşluk içerikli makro sürekliliğin gerçekçi bir tanımına dayanmalıdır ve bu da çalışmamızın konusudur. Böylesi bir bozunum mekanizmasının tanımındaki asıl darboğaz hücresel boşluklar içeren sürekliliğin hasar parametresini boşluk içeriğiyle doğrudan ilişkilendiren fiziksel-tabanlı gerçekçi bir tanımına gidilmesi gerekliliğindendir. Bu konuda çalışmamızın asıl katkısı merkezi küresel bir boşluk bulunan sıkıştırılamaz hiperelastik küresel mezo-yapı için bir homojenizasyon şeması inşaa etmemizdir. İçerisinde merkezi küresel bir boşluk bulunan sıkıştırılamaz hiperelastik küresel mezo-yapının birim elemenına mezo ölçekli hacimsel eleman (mÖHE) ismi verilmektedir. Deformasyon gradyantının asal uzamalar tarafından sürülen simetrik deplasman sınırı koşulu mÖHE'nin dış sınırına uygulanmıştır. Gerilim ve modüller gibi gerçel büyüklükler analitik olarak türetilmiş noktasal geometrik dönüşümlerle elde edilir. Bu gerçel büyüklükler daha sonra sayısal olarak radyal ve yüzeysel yönlerde kuadratür kuralları uygulanarak bulunur. Sayısal homojenizasyon şemaları modüler araçlardır. Asal değişmezler veya mikro-mekanik tabanlı ağ teorileri tabanlı bütün eş yönlü hiperelastik formülasyonlara uygulanabilirler. Bu yapıtın ikinci kısmı kapalı hücresel türdeki boşluklar ihtiva eden sıkıştırılabilir hiperelastik malzemeler için üç-ölçekli mikro-küre modelinin geliştirilmesi ile ilgilidir [46]. Burada, makro ölçekteki ifadeler mezo ölçekteki kürenin radyal ve yüzeysel yönlerinde kuadratür kuralların uygulanmasıyla sayısal olarak bulunur. Boşluklu hiperelastik malzemeler için üç boyut ölçeği **Şekil 21**'de verilmiştir.

Mikro-mezo geçiş, mÖHE'nin her noktasında afin olmayan mikro-küre modeli tabanlıdır. Burada sunulan homojinezisyan çatısı şu avantajlara sahiptir:

1. Herhangi bir hiperelastik bünye kuralının sıkıştırılabilir
2. karşılığının bulunmasında kullanılabilir,
3. Ball [3]'un çalışmasını budaklanma sonrası rejimde kısıtlı zincir uzayabilmesi etkisini de kadar genişletmektedir,
4. Konvansiyonel sonlu elemanlar paketlerine kolayca entegre edilebilir.



Şekil 21. Makro-, mezo-, ve mikro-ölçeklerde ideal kauçuk türü yapıların görünümü

3.3.1 Kuramsal Çalışmaların Özeti

Hou & Abeyaratne [29] kinematiği kullanılarak küresel boşluk içeren küresel temsili hacim elemanı sayısal homojenizasyon yöntemi ile boşluk ve sıkıştırılamaz kauçuktan oluşan kompozit kürenin davranışı elde edilecektir. Burada radyal ve yüzeysel yönlerde sırasıyla Gauss tümlevi ve Bazant & Oh [4] yaklaşımları kullanılacaktır. Numerik integrasyon sonucunda elde edilen davranış sayesinde doğrusal olmayan hiperelastik bir model ve belli bir porozite değerinin ek bir malzeme parametresi olarak ele alındığı bir kompozitin efektif sıkıştırılabilir davranışı elde edilecektir.

Boşluklu sıkıştırılamaz bir birim küre için mezo-makro dönüşümü

Bu kısımda merkezi bir boşluğu bulunan küresel bir mezo-yapının olabilir deformasyon alanının empoze edilmesine dayanan bir sayısal homojenizasyon şeması anlatılmıştır. Makro

ölçekli süreklililiğin dış yüzeyinde, Hou ve Abeyaratne [29]'nin çalışmasındakine benzeyen analitik olarak türetilmiş deformasyon alanı sıkıştırılabilirliği korumakta ve Dirichlet-tipi sınır koşullarına uymaktadır. Modeldeki kısıtlar,

i. Mezo ölçekte malzeme davranışı sıkıştırılamazdır,
ii. Mezo yapıdaki kavite boştur ve küreseldir ki bu da eş eksenli makro ölçekli davranışına sebep olmaktadır.

Ortaya çıkan homojenizasyon şeması, Neo-Hook benzeri katılara uygulanabilen Ball [3] ve Hou & Abeyaratne [29]'nin çalışmalarının, genel doğrusal olmayan hiperelastik davranış sergileyen makro ölçekli yükleme koşullarına uyarlanabilmesini sağlamaktadır.

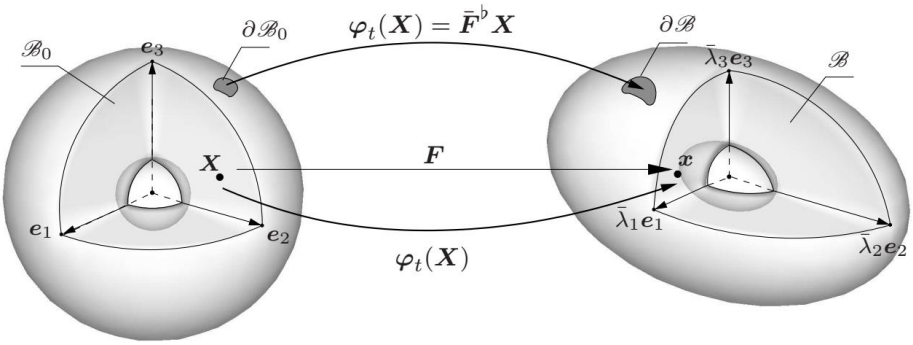
Makro ölçek durumu için kinematik ve denge

Burada $\bar{\boldsymbol{x}} := \bar{\varphi}_t(\bar{\boldsymbol{X}})$ anlık pozisyon vektörüdür ki tanım olarak işlevi $\bar{\varphi}_t : \bar{\mathfrak{B}}_0 \to \bar{\mathfrak{B}}$ olan makro ölçekli deformasyon dönüşümü kullanır, bakınız **Şekil 22**. Referans konfigürasyon ve anlık konfigürasyonlar arasında dönüşüm için makro ölçekli deformasyon gradyantı $\bar{\boldsymbol{F}} := \nabla_{\boldsymbol{X}} \bar{\varphi}_t(\bar{\boldsymbol{X}})$ kullanılır. Nitelikler üzerindeki çizgi işareti niteliğin makro ölçekte olduğunu hatırlatmak için kullanılmaktadır. $\bar{\boldsymbol{F}}$, özetle, referans ya da Lagrange noktası üzerindeki bir teğetsel niteliği anlık veya Euler karşılığına dönüştürmek için kullanılır. Bir durağanlık koşulu, makro süreklilik için doğrusal ve açısal momentumun korunumu şeklinde aşağıdaki gibi ifade edilebilir:

$$\mathrm{Div}\bar{\boldsymbol{P}} = \boldsymbol{0} \quad \text{ve} \quad \bar{\boldsymbol{F}}\bar{\boldsymbol{P}}^T = \bar{\boldsymbol{P}}\bar{\boldsymbol{F}}^T$$

Burada $\bar{\boldsymbol{P}}$ ilk Piola-Kirchhoff gerilim tensörüdür. **Şekil 22**'de verildiği üzere, deformasyon gradyantı referans konfigürasyona uygulandığında, birim vektörüler yönünde asal uzamalar cinsinden bir ölçeklenme olmaktadır (Asal uzamalar, şekilde $\bar{\lambda}_1, \bar{\lambda}_2, ve\ \bar{\lambda}_3$ olarak verilmiştir). Kartezyen koordinatlarda sağ ve sol makro ölçekte Cauchy-Green gerilim tensörleri sırasıyla aşağıdaki gibi verilmiştir:

$$\bar{\boldsymbol{C}} := \bar{\boldsymbol{F}}^T\bar{\boldsymbol{F}} \quad \text{ve} \quad \bar{\boldsymbol{b}} := \bar{\boldsymbol{F}}\bar{\boldsymbol{F}}^T$$



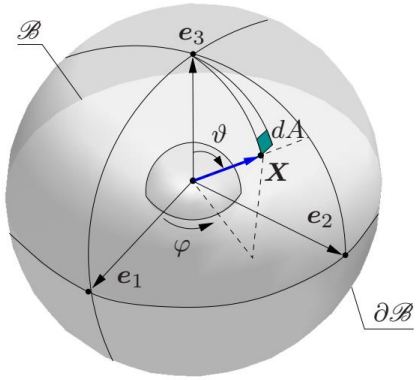
Şekil 22. İçerisinde kavite bulunan mezo yapının referans ve anlık konfigürasyonları. Kavitenin yarıçapı $\boldsymbol{r_0}$'dur. Burada $\bar{\boldsymbol{\varphi}}_{\boldsymbol{t}} : \bar{\mathfrak{B}}_{\boldsymbol{0}} \to \bar{\mathfrak{B}}$ makro ölçekli deformasyon dönüşümüdür. $\mathfrak{B}_{\boldsymbol{0}}$ ve $\mathfrak{B}$ hacmin referans ve anlık isimlendirmeleridir. Karşılık olarak, $\partial\mathfrak{B}_{\boldsymbol{0}}$ ve $\partial\mathfrak{B}$ referans ve anlık yüzey isimlendirmeleridir.

Küresel mezo yapı için mezo-makro dönüşüm

Mezo-ölçekte durağanlık koşulu

Malzeme noktası $\boldsymbol{X}$ küresel koordinatlar cinsinden (r, ϑ, φ) aşağıdaki gibi ifade edilebilir, bknz. **Şekil 23**

$$X_1 = r\,\sin\vartheta\,\cos\varphi \text{ ve } X_2 = r\,\cos\vartheta\,\sin\varphi \text{ ve } X_3 = r\,\cos\vartheta\ .$$



Şekil 23. r_0 yarıçaplı küresel mezo-yapı: $\mathbf{r_0} \leq \mathbf{r} \leq \mathbf{1}$, $\mathbf{0} \leq \boldsymbol{\vartheta} \leq \boldsymbol{\pi}$ ve $\mathbf{0} \leq \boldsymbol{\phi} \leq \mathbf{2\pi}$ sağlandığı durumda Lagrange koordinat vektörü $\boldsymbol{X}$, Küresel koordinatlarla parametrik hale getirilebilir (r, ϑ, ϕ)

Ball [3] ve Hou & Abeyaratne [29] aşağıdaki gibi, olabilir deformasyon alanı $\boldsymbol{x} \in \mathfrak{B}$ ailesi önermişlerdir:

$$x_1 = \mathcal{X}_1(r)X_1,\ x_2 = \mathcal{X}_2(r)X_2 \text{ ve } x_3 = \mathcal{X}_3(r)X_3$$

Mezo ölçekte deformasyon gradyantı aşağıdaki gibi verilmiştir:

$$\boldsymbol{F} \coloneqq \nabla_{\boldsymbol{X}}\varphi_t(\boldsymbol{X})$$

Ek-1'de detaylıca anlatıldığı üzere,

$$\mathcal{X}_1(r) = \alpha_1\mathcal{X}(r),\ \mathcal{X}_2(r) = \alpha_2\mathcal{X}(r) \text{ ve } \mathcal{X}_3(r) = \alpha_3\mathcal{X}(r)$$

ve, $\mathcal{X}(r) = \left(1 + \frac{\beta^3}{r^3}\right)^{\frac{1}{3}}$ şeklindedir. Gözlemlenebileceği üzere, $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 1$ durumunda küre homojen yüklemeler altında küreselliğini korumaktadır ve Ball [3]'un sonucunu sağlamaktadır. α_i, deforme olmuş gövdenin şekil değişimini, $\beta \geq 0$ ise hacimsel değişimini dikte etmektedir.

Mezo ölçekte sınır koşulları

Mezo ölçekteki deformasyon alanını makro ölçekteki deformasyon alanı ile bağdaştırabilmek için mezo-yapıdaki kürenin dış sınırlarında Dirichlet-tipi sınır koşulları aşağıdaki gibi uygulanabilir:

$$(D) \qquad \partial\mathfrak{B}^{\mathrm{o}} \text{ üzerinde } \varphi_t(\boldsymbol{X}) = \overline{\boldsymbol{F}}^{\flat}\boldsymbol{X}$$

İç kavite yüzeyinden oluşan iç sınır $\partial\mathfrak{B}^{\mathrm{i}}$ üzerinde Neumann –tipi sınır koşul ise:

$$(N) \qquad \partial\mathfrak{B}^{\mathrm{i}} \text{ üzerinde } \boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{n} = 0\ (\text{burada } \boldsymbol{q} = \boldsymbol{\tau}\cdot\boldsymbol{n})$$

$\overline{\boldsymbol{F}}^{\flat}$ köşegen deformasyon gradyantı olup makro ölçekteki deformasyon gradyantı $\overline{\boldsymbol{F}}$'in öz değerleri olan $\bar{\lambda}^i$'larından oluşur. $\overline{\boldsymbol{F}}^{\flat}$ mezo yapının sınırlarında işlev görmektedir. $\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{q}, ve\ \boldsymbol{n}$ sırasıyla Kirchhoff gerilim tensörü, Euler'sel yüzey çekme (traction) vektörü ve yüzeye dik normal vektördür.

Mezo-Makro Dönüşüm

Tablo 2. Mikro, mezo ve makro niteliklerin tanımları

Mikro	Mezo	Makro
$\boldsymbol{F} = \nabla_{\boldsymbol{X}}\varphi_t(\boldsymbol{X})$	$\overline{\boldsymbol{F}} = \sum_{\alpha=1}^{3} \bar{\lambda}_\alpha\, \boldsymbol{N}_\alpha \otimes \boldsymbol{N}_\alpha$	$\overline{\boldsymbol{F}}^{\flat} = \sum_{i=1}^{3} \bar{\lambda}^i\, \boldsymbol{e}_i \otimes \boldsymbol{e}_i$
$\boldsymbol{c} = \boldsymbol{F}^T\boldsymbol{F}$	$\overline{\boldsymbol{C}} = \sum_{\alpha=1}^{3} \bar{\lambda}_\alpha^2\, \boldsymbol{N}_\alpha \otimes \boldsymbol{N}_\alpha$	$\overline{\boldsymbol{C}}^{\flat} = \sum_{i=1}^{3} \bar{\lambda}_i^2\, \boldsymbol{e}_i \otimes \boldsymbol{e}_i$

$\boldsymbol{S} := 2\frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{C}}$	$\overline{\boldsymbol{S}} := 2\frac{\partial \overline{W}}{\partial \overline{\boldsymbol{C}}}$	$\overline{\boldsymbol{S}}^{\flat} := 2\frac{\partial \overline{W}}{\partial \overline{\boldsymbol{C}}^{\flat}}$
$\mathbb{C} = 2\frac{\partial \boldsymbol{S}}{\partial \boldsymbol{C}}$	$\mathbb{C} = 2\frac{\partial \overline{\boldsymbol{S}}}{\partial \overline{\boldsymbol{C}}}$	$\overline{\mathbb{C}}^{\flat} := 2\frac{\partial \overline{\boldsymbol{S}}^{\flat}}{\partial \overline{\boldsymbol{C}}^{\flat}}$

Sonlu elastisitede klasik kullanılan homojenizasyon yöntemi makro ölçekte homojenize özgül enerji fonksiyonuna dayanmaktadır.

$$\overline{W}(\overline{\boldsymbol{F}}) = \frac{1}{|\mathcal{V}|}\int_{\mathfrak{B}} \psi(\nabla_{\boldsymbol{X}}\varphi_t)dV$$

Dolayısıyla makro ölçekli ilk Piola-Kirchhoff gerilimi aşağıdaki gibi ifade edilebilir:

$$\overline{\boldsymbol{P}} := \frac{\partial \overline{W}}{\partial \overline{\boldsymbol{F}}} = \frac{1}{|\mathcal{V}|}\int_{\mathfrak{B}} \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{F}} : \frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial \overline{\boldsymbol{F}}} dV$$

Benzer şekilde, makro ölçekte ikinci Piola-Kirchhoff gerilim tensörü,

$$\overline{\boldsymbol{S}} := 2\frac{\partial \overline{W}}{\partial \overline{\boldsymbol{C}}} = \frac{1}{|\mathcal{V}|}\int_{\mathfrak{B}} 2\frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{C}} : \frac{\partial \boldsymbol{C}}{\partial \overline{\boldsymbol{C}}} dV$$

Aşağıda, dönüşümlere yardımcı, dördüncü dereceden ve altıncı dereceden tensörler olan $\mathbb{Q}$ ve $\mathbb{H}$ tanımlanmıştır:

$$\mathbb{Q} = \frac{\partial \boldsymbol{C}}{\partial \overline{\boldsymbol{C}}^{\flat}} \; ve \; \mathbb{H} = \frac{\partial \mathbb{Q}}{\partial \overline{\boldsymbol{C}}^{\flat}}$$

Bu denklemler kullanılarak dönüşümler ise şu şekilde yazılabilir (detaylar için lütfen Ek-1'e başvurunuz):

$$\overline{\boldsymbol{S}}^{\flat} = \frac{1}{|\mathcal{V}|}\int_{\mathfrak{B}} \boldsymbol{S} : \mathbb{Q} dV$$

$$\overline{\mathbb{C}}^{\flat} = 2\frac{\partial \overline{\boldsymbol{S}}^{\flat}}{\partial \overline{\boldsymbol{C}}^{\flat}} = \frac{1}{|\mathcal{V}|}\int_{\mathfrak{B}} [\mathbb{Q}^T : \mathbb{C} : \mathbb{Q} + 2\boldsymbol{S} : \mathbb{H}]dV$$

Kısacası dördüncü dereceden $\mathbb{Q}$ ve altıncı dereceden $\mathbb{H}$ geometrik dönüşüm tensörleri mezo ölçekli gerilim ve modülü makro ölçekli gerilim ve modül terimlerine aşağıdaki gibi dönüştürmektedir:

$$\{\mathbb{Q}, \mathbb{H}\} : \{\boldsymbol{S}, \mathbb{C}\} \rightarrow \{\overline{\boldsymbol{S}}^{\flat}, \overline{\mathbb{C}}^{\flat}\}$$

<u>Küre üzerinde sayısal integrasyon</u>

Yukarıdaki kısmın sayısal olarak uygulanabilmesi için sayısal integrasyona ihtiyaç vardır. Bu ise radyal yönde ve eş radyal yüzeyde çizgi elemanlarına ayırma işlemi gerektirir. Mezo ölçekteki bir değişken $(\cdot)$'in radyal yönde sürekli ortalamasının alınması aşağıdaki gibi yapılabilir:

$$\langle(\cdot)\rangle = \frac{1}{|\mathcal{R}|}\int_{r_0}^{1} r^2(\cdot)dr \approx \sum_{i=1}^{m} r^{i^2}(\cdot)w^i$$

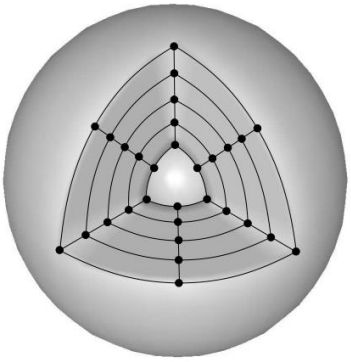
m ayrık noktaların sayısıdır w^i ise ağırlık faktörleridir. Benzer şekilde mezo ölçekteki bir değişken $(\cdot)$'in eş radyal yüzeydeki sürekli ortalamasının alınması aşağıdaki gibi yapılabilir:

$$\langle(\cdot)\rangle = \frac{1}{|S|}\int_{S} (\cdot)dA \approx \sum_{j=1}^{n}(\cdot)v^j$$

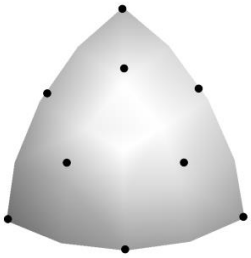
Sonuç olarak, küresel mezo yapı üzerindeki hacimsel integralin ayrık toplama dönüşümü şu şekilde yapılmaktadır

$$\frac{1}{|\mathcal{V}|}\int_{\mathcal{V}} (\cdot)dV \approx \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} r^{i^2}\,(\cdot)w^i v^j\,.$$

Küre üzerinde alınan kuadratür noktalarının sekizde birlik kısmı **Şekil 24**'te kürenin birinci oktantı üzerinde gösterilmiştir.



İntegrasyon ızgarasının
radyal yöndeki görünümü



İntegrasyon noktalarının
yüzey üzerindeki görünümü

Şekil 24. Kürenin ilk oktantında, entegrasyon ızgarasının radyal yönde ve küre yüzeyinin üzerinde tasvir edilmiş görünümü

Tablo 3. Kuadratürde kullanılmak üzere yarım küre için zincirlerin nokta ve ağırlık değerleri

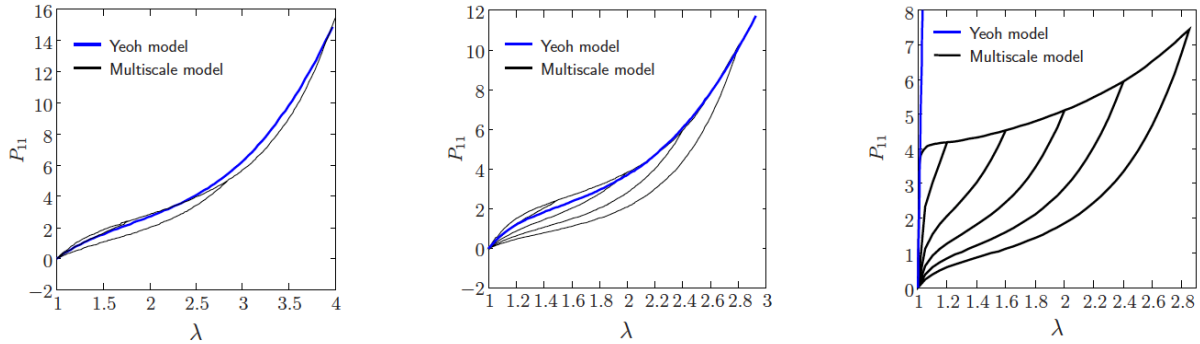
i	v_1^i	v_1^i	v_1^i	$w^i/2$
1	0	0	1	0.026521424
2	0	1	0	0.026521424
3	1	0	0	0.026521424
4	0	0.707106781	0.707106781	0.019930148
5	0	-0.707106781	0.707106781	0.019930148
6	0.707106781	0	0.707106781	0.019930148
7	-0.707106781	0	0.707106781	0.019930148
8	0.707106781	0.707106781	0	0.019930148
9	-0.707106781	0.707106781	0	0.019930148
10	0.836095597	0.387907304	0.387907304	0.025071237
11	-0.836095597	0.387907304	0.387907304	0.025071237
12	0.836095597	-0.387907304	0.387907304	0.025071237
13	-0.836095597	-0.387907304	0.387907304	0.025071237
14	0.387907304	0.836095597	0.387907304	0.025071237
15	-0.387907304	0.836095597	0.387907304	0.025071237
16	0.387907304	-0.836095597	0.387907304	0.025071237
17	-0.387907304	-0.836095597	0.387907304	0.025071237
18	0.387907304	0.387907304	0.836095597	0.025071237
19	-0.387907304	0.387907304	0.836095597	0.025071237
20	0.387907304	-0.387907304	0.836095597	0.025071237
21	-0.387907304	-0.387907304	0.836095597	0.025071237

Tablo 4. Radyal yönde Gauss tümlevi için kullanılan integrasyon noktaları: $\boldsymbol{x_m = (1 + r_0)/2 \quad l = 1 - r_0}$. $\boldsymbol{r_0}$ birim küre içinde kavitenin yarıçapını ifade etmektedir.

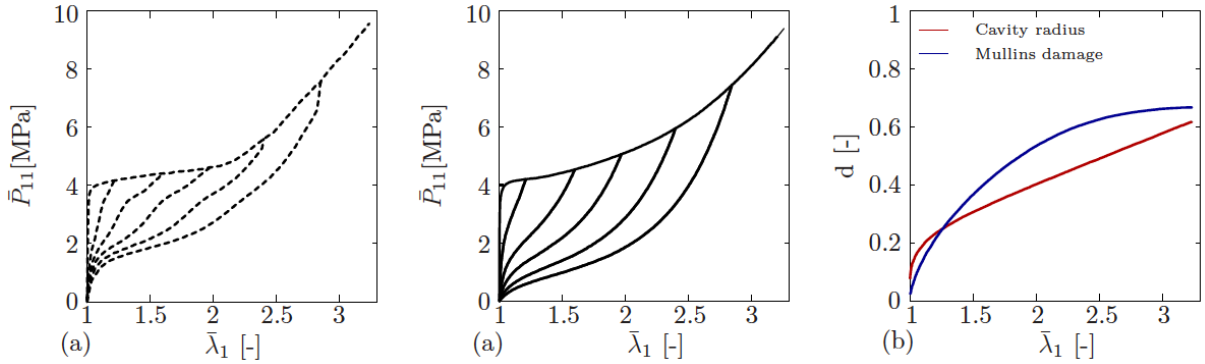
i	r^i	ν^i
1	$x_m - \frac{l}{6}\sqrt{5+2\sqrt{10/7}}$	$\frac{322-13\sqrt{70}}{900}\cdot\frac{3l}{2}$
2	$x_m - \frac{l}{6}\sqrt{5-2\sqrt{10/7}}$	$\frac{322+13\sqrt{70}}{900}\cdot\frac{3l}{2}$
3	x_m	$\frac{128}{225}\cdot\frac{3l}{2}$
4	$x_m + \frac{l}{6}\sqrt{5-2\sqrt{10/7}}$	$\frac{322+13\sqrt{70}}{900}\cdot\frac{3l}{2}$
5	$x_m + \frac{l}{6}\sqrt{5+2\sqrt{10/7}}$	$\frac{322-13\sqrt{70}}{900}\cdot\frac{3l}{2}$

3.3.2 Sayısal Çalışmaların Özeti

Öncelikle Li ve ark. [37] tarafından gerçekleştirilen tek eksenli çekme, çift eksenli eş-çekme ve poker-çipi veya (pancake test) olarak adlandırılan ve tamamen hacimsel deformasyona neden olan tek eksenli çekme deneylerinden elde edilen sonuçlara öncelikle hiperelastik Yeoh modeli ve geliştirdiğimiz çok-ölçekli mikro-küre hasar modeli ayrı ayrı fit edilmiştir. Sonuçlar **Şekil 25** ve **Şekil 26**'da verilmiştir. Mikro küre imodeli çin sadece poker-çipi deneylerinden elde edilen sonuçlar gösterilmiştir.



Şekil 25: Li ve ark. [37] tarafından gerçekleştirilen tek eksenli çekme, çift eksenli eş-çekme ve poker-çipi tarzı numunelerle tek eksenli hacimsel uzama deneyleri ve hiperelastik Yeoh modeli ile elde edilen sonuçlar.

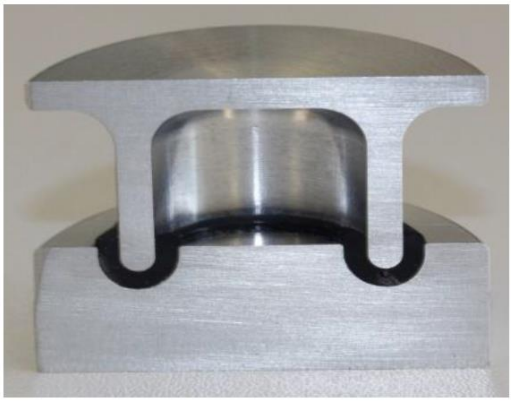


Şekil 26: Li ve ark. [37] tarafından gerçekleştirilen tek eksenli çekme, çift eksenli eş-çekme ve poker-çipi tarzı numunelerle tek eksenli hacimsel uzama deneyleri ve geliştirilen çok ölçekli mikro-küre hasar modeli ile elde edilen sonuçlar.

Elde edilen sonuçlar malzeme noktasında geliştirilen kavitasyon modelinin başarılı olduğunu göstermektedir.

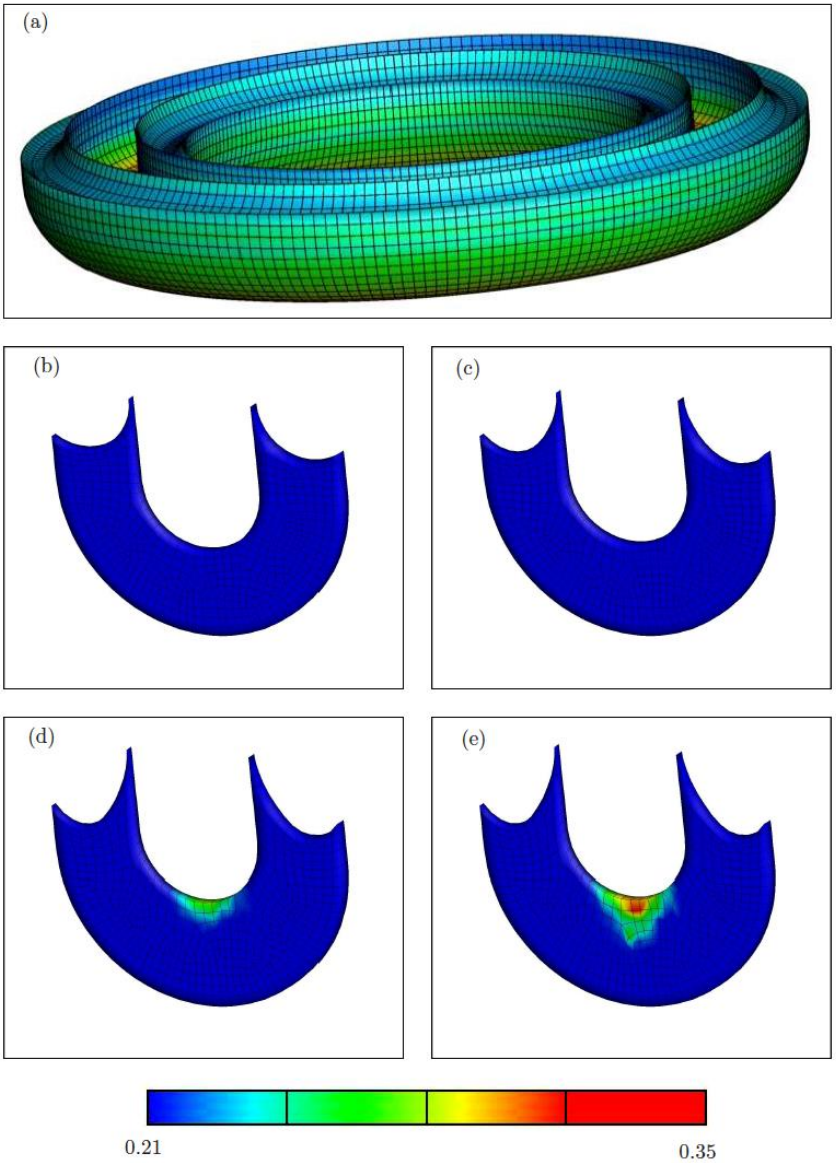
Önerilen bünye modeli açık kaynak kodlu Sonlu Elemanlar Yöntemi Programı (FEAP) içine malzeme alt-programı olarak entegre edilmiştir. Bunun için silikon yap İç yarıçapı 1.5mm dış yarıçapı 3.5mm olan kauçuk türü silikon yapıştırıcı iki metal plaka arasında yer alıp plakaları birbirine mükemmel bir şekilde yapıştırdığı kabul edilmektedir. Bu deney numunesi BOSCH firması tarafından geliştrilmiş deney sonuçları telif hakları nedeniyle kısmen paylaşılabilmektedir. Deney numunesinin resmi **Şekil 27**'de gösterilmektedir. Benzetim

sonuçları ile deneysel sonuçların karşılaştırılması **Şekil 29**'de görülmektedir. Malzeme parametreleri Li ve ark. [37] tarafından yapılan deneylerden elde edildiği için ancak kalitatif bir karşılaştırma mümkün olmaktadır. Bosch firması tarafından bizimle paylaşılan numune geometrisi için gerçekleştirilen sonlu elemanlar yöntemi benzetimleri ile elde edilen kavitasyon başlama noktaları deneyleri gerçekleştiren ekip tarafından teyit edilmiştir, bknz. **Şekil 28**.
Benzetim esnasında karşılaşılan en önemli problem, malzeme kararsızlığı nedeniyle yakınsama problemleri olmuştur. Bunun nedeni, kavitasyonun başlaması ile birlikte minimizasyon problemin çözümünün benzersizliğini kaybetmesinden kaynaklanmaktadır. Esasında bu kararsızlık beklenen bir durumdur. Nedeni ise matematiksel kararsızlığın yani çözümün çatallaşması (bifurcation point) başlangıcı fiziksel olarak elastik kararsızlık olarak kavitasyon başlangıcına tekabül etmektedir. Yine de viskoz regularisasyon uygulanarak kavitasyon başlangıcı ve sonrasında belli bir miktar deformasyon düzeyine kadar sonuç elde edilebilmiştir. **Şekil 29**'de klasik hiperelastik ve hasar modelleri ile elde edilemeyen, kavitasyon başlangıcında global yük-deplasman eğirişindeki keskin dönüş, geliştirdiğimiz model ile yakalanabilmektedir. Algoritmanın daha ileri noktalara kadar sonuç vermesi için "explicit finite element method " kullanılarak benzetimlerin tekrarlanması amaçlanmaktadır.

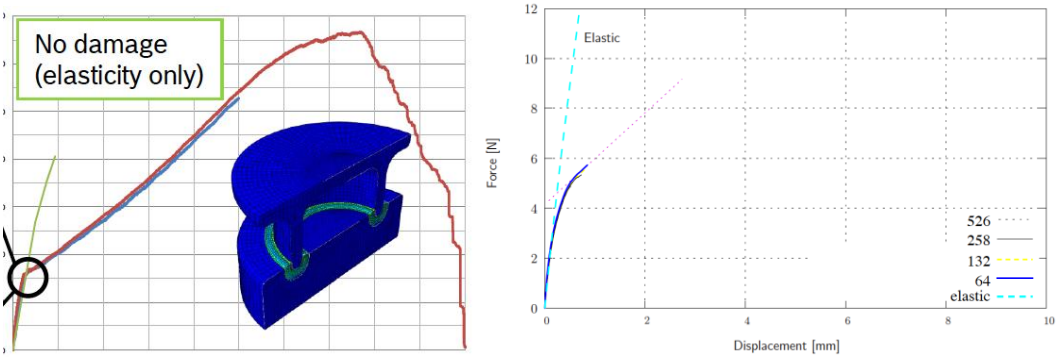


Şekil 27: Silikon yapıştırıcı için 3 boyutlu deney numunesi

Kavitasyon başlangıcı için ikinci bir benzetim, Cristiano ve arkadaşları tarafından gerçekleştirilen deney sonuçları için kalitatif bir karşılaştırma yapılmıştır. Oluşturulan sonlu elemanlar yöntemi beklendiği gibi kek-dilimine benzeyen kauçuk numunesinde hidrostatik yüklemenin en yüksek olduğu nokta olan dairesel kesit merkezinde başlamıştır. Dairesel kesitin merkezi ve dış kenarında benzetim başında ve benzetim sonunda mezo-yapının evrimi **Şekil 30'**da gösterilmektedir. Temsili mezo-yapıda kavite yarıçapı başlangıç anında 0.05'ten 0.9 düzeyine kadar ulaşmaktadır. Geliştirilen çok ölçekli model kavitasyon başlangıcını kalitatif ve kantitatif olarak tahmin etmekte başarılı olurken, kavitasyonun lokal olmayan büyümesi ve yayılması esnasında sayısal kararsızlıklar göstermektedir.
Bu sorun modelin formüle ediliş şeklinden değil, içinde boşluklar olan elastik bir ortamda gözlemlenen malzeme mikro-yapısından kaynaklanan desen oluşumlarına benzer bir durumla karşılaşıyor olmamızdan kaynaklanmaktadır. Birbirine yakın durumdaki birden farklı kavite, makroskopik bir yük altında aynı global deplasman düzeyine denk gelen birden farklı mezoskopik deformasyon deseni (pattern formation) oluşturabilmektedir. Malzeme kararsızlığı (material instability) plastisite, hasar mekaniği gibi davranış gösteren malzemelerde sıkça karşılaşılan bir matematiksel problemdir. Elde ettiğimiz bünye denklemlerinin yarattığı malzeme kararsızlığı bu bağlamda değerlendirilmelidir. Malzeme noktasında deneysel sonuçları modelleyebilirken üç boyutlu sınır değer problemlerinde oluşan kararsızlık, 3-boyutlu geometrinin sonsuz sayıda farklı çözüme izin vermesinden kaynaklanmaktadır. Tek malzeme noktasında deformasyon bilindiğinden böyle bir durum söz konusu değildir. Gerçekte, deneylerde gözlemlenen şey bu sonsuz kombinasyondan en olası olanlarından birinin deformasyon modu olarak gözlemlenmesinden ibarettir. Deneyler altında gerçekleşen deformasyonlar ve kalıcı hasar, numune hazırlanırken engellenemeyen geometrik ve malze üretim kusurlarının tetiklediği en yakın çözüme tekabül etmektedir.

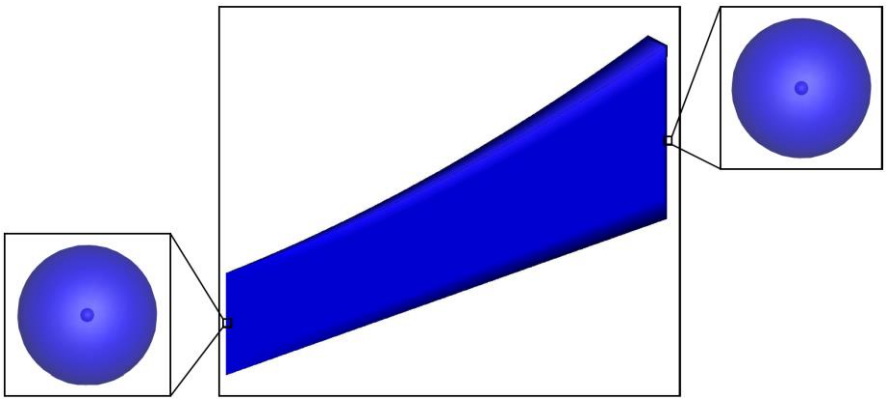


Şekil 28. (a) İki metal plaka arası silikon yapıştırıcı halka: Alt silindirik yüzeyden tutulan ve üst silindirik yüzeyden çekilen silikon yapıştırıcıda (b) u=0mm, (c) u=0.1mm, (d) u=0.2mm, (e) u=0.35mm için üst metal plakanın hemen altında gerçekleşen cavitasyon yarıçapı değişimi. Lejant normalize edilmiş kavite yarıçapını göstermektedir.

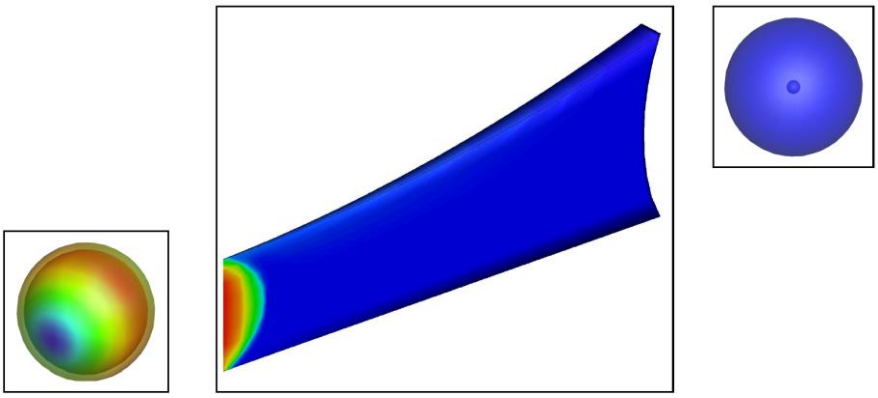


Şekil 29: Bosch GmbH, Renningen tarafından elde edilen sonuçlar (sol) ile geliştirilen model (sağ) ile yapılan benzetim sonuçlarının karşılaştırılması

(a)



(b)



Şekil 30. Cristiano ve ark. [12] calismasinda kullanılan geometri üzerinde yapılan kavitasyon benzetimi: (a) Başlangıç konfigürasyonu, (b) merkezde kavitasyon başlangıcına denk gelen deforme olmuş konfigürasyon.

4. Bulgular ve Sonuç

4.1 Bulgular

Geliştirilen kuramlar kalitatif olarak gayet iyi kalitatif sonuçlar vermektedir. Proje kapsamında geliştirilen faz alanı çatlak modeli ve elastik ve viskoelastik yırtılmayı kalitatif olarak başarıyla modelleyebilmektedir. Proje esnasında en çok zorlandığımız nokta geliştirilen modellerin gerek malzeme karakterizasyonu gerekse 3 boyutlu homojen olmayan geometrilerden elde edilen deneysel sonuçların doğrulama çalışmalarının yapılması idi. 3 boyutlu numunelerin malzeme parametreleri bilinmezken, homojen sonuçlar elde edilen kauçuk türleri 3 boyutlu deneylerin gerçekleştirildiği farklı çalışmalardaki kauçuk numunelerin benzer formulasyonlara sahip olmamasıydı. Literatürde yeterli sayıda doğrulama yapılacak çalışma bulmakta zorlandık. Parametre belirmele problemini gerek yırtılma kuramının gerekse kavitasyon modelinin doğrulanması aşamasında yaşadık. Bosch firması ile başlattığımız iş birliği ile önümüzdeki süreçte deney sonuçlarının yayınlanması konusunda araştırma partnerlerimizin izin alması ve onların bize sunacağı deneysel verilerle kavitasyon sonuçlarının doğrulamasını yapmayı planlıyoruz. Fakat, elde edilen sonuçlar kalitatif düzeyde dahi rahatlıkla alanında en iyi dergilerde yayınlanabilecek durumdadır. Makaleleri bu nedenle, (i) kuramsal ve sayısal çalışmalar ve (ii) deneysel çalışmalar ve doğrulama çalışmaları şeklinde ikiye bölerek yayımlamayı düşünüyoruz. Bu proje kapsamında kuramsal ve sayısal çalışmalar tamamlanmış olup deneysel sonuçlar ile eniyileme çalışmaları yapılacaktır.

Yakın zamanda sipariş ettiğimiz test cihazının kurulumu tamamlanarak doğrulama çalışmalarını ODTÜ Hesaplamalı Mikromekanik Laboratuvarı bünyesinde kuracağımız kauçuk ve polimerik malzemelere yönelik yüksek hassasiyete sahip evrensel test cihazı ile gerçekleştireceğiz. Roketsan A.Ş.'nin desteğiyle ODTÜ Makine Mühendisliği'nde Hesaplamalı Mikromekanik Laboratuvarı'nın içinde kuracağımız Test Laboratuvarı Haziran 2019'da kullanıma hazır hale gelecektir. Bu laboratuvarda proje yürütücüsü uluslararası iş birlikleri yardımıyla elde edeceği teknoloji transferi ile kauçuk türü malzemelerde kavitasyon, çatlak başlangıcı ve ilerlemesi konularında standart olmayan test metodolojileri geliştirmeyi

planlamaktadır. Üç-ölçekli mikroküre kavitasyon modeli [70] boşluklu sıkıştırılabilir polimerik köpüklerin mekanik davranışı ve sıkıştırılamaz kauçuk türü malzemelerde kavitasyon başlangıcını ve büyümesini malzeme noktasında gayet başarılı bir şekilde kalitatif ve kantitatif olarak modelleyebilmektedir. Ancak yapısal düzeyde kalitatif ve kantitatif çalışma gereksinimi bulunmaktadır.

4.2 Sonuç/Tartışma

Faz alanı yaygın çatlak kuramı kauçuk türü malzemeler için ciddi bir perspektif taşımaktadır. Özellikle adaptif sonlu elemanlar yöntemi ile birlikte zaman artırımını otomatik olarak ayarlayan algoritmalar (auto-time stepping algorithms) ve adaptif yeniden ağlama algoritmaları (adaptive remeshing algorithms) ile birlikte çok ciddi uygulamalara konu olabilir. İleride sonlu viskoelasitise kuramı birden fazla Maxwell elemanı yardımıyla (10-12 Maxwell elemanı) daha geniş bir spektrumda çatlak hızının enerji bırakma nispeti arasındaki ilişkiyi kalitatif ve kantitatif olarak gösteren bir çalışma yapılması gerekmektedir. Bu çalışma öncesinde deneysel alt yapımız yardımıyla hiperelastik ve viskoelastik malzeme parametreleri yüksek hassasiyetle belirlenmiş malzeme bünye modelleri ile aynı numuneler için farklı çekme hızlarında elde edilmiş yırtılma deneylerinin doğrulaması yapılacaktır. Aynı şekilde kavitasyon fenomeni için de Bosch Gmbh (Almanya Stuttgart-Renningen) ile ikili iş birliği yapılarak kavitasyon başlangıcı ve kavitasyon büyümesi için deneysel doğrulama çalışmaları geliştirilecektir.

4.3 Proje Çıktıları

Proje kapsamında yayımlanan makale ve bildiriler:

1. Hüsnü Dal, Barış Cansız, Christian Miehe. A Three-scale compressible micro-sphere model for hyperelastic materials. International Journal for Numerical Methods in Engineering 116, 412-433 (2018).

Bakınız, **Ek-1.pdf**

2. Hüsnü Dal, Yashar Badienia, Kemal Açıkgöz, Funda Denli. A Novel Parameter Identification Toolbox for the Selection of Hyperelastic Constitutive Models from Experimental Data. Proceedings of the 7th GACM Colloquium on Computational Mechanics for Young Scientists from Academia and Industry.

Bakınız, **Ek-2.pdf**

3. Hüsnü Dal, Marc-Andre Keip, Charlotte Kuhn. Phase-Field Models for Cracking in Complex Materials. 6th European Conference on Computational Mechanics (Solids, Structures and Coupled Problems) (ECCM 6).

Bakınız, **Ek-3.pdf**

4. Funda Aksu Denli, Hüsnü Dal. A rate-dependent phase-field approach for the failure of ruberlike materials. 6th European Conference on Computational Mechanics (Solids, Structures and Coupled Problems) (ECCM 6).

Bakınız, **Ek-4.pdf**

Proje kapsamında yayımlanacak olan makaleler ve bildiriler

1. Hüsnü Dal, Barış Cansız. A multi-scale approach for cavity growth in rubbery polymers. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, hazırlanmakta

Bakınız, **Ek-5.pdf**

2. Hüsnü Dal, Yashar Badienia, Kemal Açıkgöz, Funda Denli. An Extensive Review and Parameter Optimization Study on Hyperelastic Constitutive Models for Rubber-like Materials, European Journal of Mechanics - A/Solids, hazırlanmakta.

Bakınız, **Ek-6.pdf**

3. Funda Denli, Osman Gültekin., Hüsnü Dal. A rate-dependent phase-field model for the failure of rubber-like materials, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, hazırlanmakta

4. Hüsnü Dal, Yashar Badienia, Kemal Açıkgöz, Funda Denli: A Comparative Study on Hyperelastic Constitutive Models on Rubber – State of the Art after 2006 –, European Conference on Constitutitve Models for Rubbers, kabul edildi, konferans makalesi hazırlanmış ve editore iletilmiştir. 25-28 Haziran 2010 tarihinde düzenlecek ECCMR konferansı öncesinde cilt ve sayfa numarası alacaktır.

Bakınız, **Ek-7.pdf** (kabul edilen öz)

Kaynakça

[1] Alfano, G., Crisfield, M. A. 2001. “Finite element interface models for the delamination analysis of laminated composites: Mechanical and computational issues”, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 50, 1701–1736.

[2] Arruda, E. M., Boyce, M. C. 1993. “A three-dimensional constitutive model for the large stretch behavior of rubber elastic materials”, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 41, 389–412.

[3] Ball J. M. 2006. Discontinuous equilibrium solutions and cavitation in nonlinear elasticity. Philos Trans R Soc London, Ser A, Math Phys Sci. ;306:557-611.

[4] Bazant, Z. P., Oh, B. H. 1986. “Efficient Numerical Integration on the Surface of a Sphere”, Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik, 66, 37–49.

[5] Blatz, P. J., Ko, W. L., 1962. “Application of finite elasticity to deformation of rubber materials”, Transaction Society of Rheology, 6, 223.

[6] Bourdin, B., Francfort, G. A., Marigo, J. J. 2008. “Special invited exposition: The variational approach to fracture”, Journal of Elasticity, 91, 5–148.

[9] Boyce, M. C., Arruda, E. M. 2000. “Constitutive models of rubber elasticity: a review”, Rubber Chemistry and Technology, 73, 504–523.

[10] Chaboche J. 1988. Continuum damage mechanics: part I—general concepts. Journal of Applied Mechanics, 55, 59-64.

[11] Chaboche J. 1988. Continuum damage mechanics: part II—damage growth, crack initiation, and crack growth. J Appl Mech.;55:65-72.

[12] Cristiano, A., Marcellan, A., Long, R., Hui, C. Y., Stolk, J., Creton, C., 2010. “An experimental investigation of fracture by cavitation of model elastomeric networks”, Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics, 48, 1409–1422.

[13] Danielsson, M., Parks, D., Boyce, M. 2004. “Constitutive modeling of porous hyperelastic materials”, Mechanics of Materials, 36, 347 – 358.

[14] Deam, R. T., Edwards, S. F. 1976. “The theory of rubber elasticity”, Philosophical transactions of the Royal Society of London A, 280, 317–353.

[15] Flory, P. J., Erman, B. 1982. “Theory of elasticity of polymer networks”, Macromolecules, 15, 800–806.

[16] Flory, P. J. 1989. Statistical Mechanics of Chain Molecules. Oxford: Clarendon Press.

[17] Geers M., Kouznetsova V., Brekelmans W. 2010. An experimental investigation of fracture by cavitation of model elastomeric networks. J Comput Appl Math.;234:2175-2182.

[18] Gent, A. N., Lindley, P. B., 1958. “Internal rupture of bonded rubber cylinders in tension”, Proceedings of the Royal Society of London A, 249, 195–205.

[19] Gent A. N. 1996. A new constitutive relation for rubber. Rubber Chem Technol.;69:59-61.

[20]. Gibson L. J., Ashby M. F. 1997. Cellular Solids: Structure and Properties. Cambridge, UK: Cambridge University Press.

[21] Griffith, A. A. 1920. “The phenomena of rupture and flow in solids”, Philosophical transactions of the Royal Society of London A, 221, 163–198.

[22] Greensmith, H., Thomas, A. 1955. “Rupture of rubber. III. Determination of tear properties”, Journal of Polymer Science, 18, 189–200.

[23] Greensmith, H. 1956. “Rupture of rubber. IV. tear properties of vulcanizates containing carbon black”, Journal of Polymer Science, 21, 175–187.

[24] Heinrich, G., Straube, E. 1983. “On the strength and deformation dependence of the tube-like topological constraints of polymer networks, melts and concentrated solutions. I. the polymer network case”, Acta Polymerica, 34, 589–594.

[25] Heinrich, G., Kaliske, M. 1997. “Theoretical and numerical formulation of a molecular based constitutive tube-model of rubber elasticity”, Computational and Theoretical Polymer Science, 7, 227–241.

[26] Horgan C., Murphy J. 2009. Compression tests and constitutive models for the slight compressibility of elastic rubber-like materials. Int J Eng Sci.;47:1232-1239.

[27] Horgan C., Murphy J. 2009. On the volumetric part of strain-energy functions used in the constitutive modeling of slightly compressible solid rubbers.Int J Eng Sci.;46:3078-3085

[28] Horgan C., Abeyaratne R. 1986. A bifurcation problem for a compressible nonlinearly elastic medium: growth of a micro-void. J Elast.;16:189-200.

[29] Hou, H. S., Abeyaratne, R. 1992. “Cavitation in elastic and elastic–plastic solids”, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 40, 571–722.

[30] Kachanov LM. 1986. Introduction to Continuous Damage Mechanics. Dordrecht, The Netherlands: Martinus Nijhoff Publishers.

[31] Kroon, M. 2011. “Steady-state crack growth in rubber-like solids”, International Journal of Fracture, 169, 49–60.

[32] Kuhn, W. 1934. “Über die gestalt fadenförmiger moleküle in lösungen”, Kolloid-Zeitschrift, 68, 2–15.

[33] Kuhn, W. 1936. “Beziehungen zwischen molekülgröße. statistischer molekülgestalt und elastischen eigenschaften hochpolymerer stoffe”, Kolloid-Zeitschrift, 76, 258–271.

[34] Kuhn, W., Grün, F. 1942. “Beziehungen zwischen elastischen konstanten und dehnungsdoppelbrechung hochelastischer stoffe”, Kolloid-Zeitschrift, 101, 248–271.

[35] Lake, G., Thomas, A. 1967. “The strength of highly elastic material”, Proceedings of the Royal Society of London, 300, 108–119.

[36] Lemaitre J. 1996. A Course on Damage Mechanics. 2nd ed. Berlin, Germany: Springer–Verlag.

[37] Li, J., Mayau, D., Lagarrigue, V. 2008. A constitutive model for cavitation and cavity growth in rubber-like materials under arbitrary tri-axial loading. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 44: 6080 – 6100.

[38] Lopez-Pamies O., Castaneda P. 2006. On the overall behavior, microstructure evolution, and macroscopic stability in reinforced rubbers at large deformations: II–application to cylindrical fibers. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 54, 831-863.

[39] Lopez Pamies O., Castaneda P. 2006. On the overall behavior, microstructure evolution, and macroscopic stability in reinforced rubbers at large deformations: I–theory. J Mech Phys Solids.;54:807-830.

[40] Lopez-Pamies O., Castaneda P. 2007. Homogenization-based constitutive models for porous elastomers and implications for macroscopic instabilities: I–analysis. J Mech Phys Solids.;55:1677-1701.

[41] Lopez-Pamies O., Castaneda P. 2007. Homogenization-based constitutive models for porous elastomers and implications for macroscopic instabilities: II–results. J Mech Phys Solids.;55:1702-1728.

[42] Lopez-Pamies O. 2010. An exact result for the macroscopic response of particle-reinforced neo-Hookean solids. J Appl Mech.;77(021016).

[43] Lopez-Pamies O., Idiart M. I., Nakamura T. 2011. Cavitation in elastomeric solids: I-a defect-growth theory. J Mech Phys Solids.;59:1464-1487.

[44] Lopez-Pamies O,, Idiart M., Nakamura T. 2011. Cavitation in elastomeric solids: II—onset-of-cavitation surfaces for Neo-Hookean materials. J Mech Phys Solids.;59:1488-1505.

[45] Miehe C. 2003. Computational micro-to-macro transitions for discretized micro-structures of heterogeneous materials at finite strains based on the minimization of averaged incremental energy. Comput Methods Appl Mech Eng.;192:559-591.

[46] Miehe, C., Göktepe, S., Lulei, F. 2004. “A micro-macro approach to rubber-like materials–Part I: the non-affine micro-sphere model of rubber elasticity”, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 52, 2617–2660.

[47] Miehe, C., Göktepe, S. 2005. “A micro–macro approach to rubber-like materials. Part II: The micro-sphere model of finite rubber viscoelasticity”, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 53, 2231–2258.

[48] Miehe, C., Schanzel L.M. 2014 “Phase field modeling of fracture in rubbery polymers. Part I: Finite elasticity coupled with brittle failure”, Journal of the Mechanics and Physics of Solids 65 , 93–113.

[49] Mooney, M. 1940. “Theory of Large Elastic Deformation”, Journal of Applied Physics, 11, 582–592.

[50] Ogden, R. 1972. “Large deformation isotropic elasticity: on the correlation of theory and experiment for incompressible rubberlike solids”, Proceedings of the Royal Society of London A, 326, 565–584.

[51] Ogden, R. W. 1984. Non-linear Elastic Deformations. Chichester: Ellis Horwood.

[52] Persson, B. N. J., Albohr, O., Heinrich, G., Ueba, H. 2005. “Crack propagation in rubber-like materials”, Journal of Physics: Condensed Matter, 17, 1071–1142.

[53] Persson, B. N. J., Brener, E. A. 2005. “Crack propagation in viscoelastic solids”, Physical Review E, 71, 036123.

[54] Reese, S., Govindjee, S. 1998. “Theoretical and numerical aspects in the thermos-viscoelastic material behavior of rubber-like polymers”, Mechanics of time-Dependent Materials, 1, 357-396.

[55] Reese, S., Govindjee, S. 1998. “A theory of finite visco-elasticity and numerical aspects”, International Journal of Solids and Structures, 35, 3455-3482.

[56] Rivlin, R. S. 1948. “Some topics in finite elasticity I. Fundamental Concepts”, Philosophical transactions of the Royal Society of London A, 240, 459–490.

[57] Schanzel, L., Dal H. and Miehe C. 2013. “On Micromechanically-Based Approaches to Failure in Polymers”, Proc. Appl. Math. Mech., Vol. 13, pp. 557–560,

[58] Schanzel, L. 2015. “Phase Field Modeling of Fracture in Rubbery and Glassy Polymers at Finite Thermo-Viscoelastic Deformations”, PhD thesis, University of Stuttgart.

[59] Shariff, M. H. B. M. 2000. “Strain Energy Function for Filled and Unfilled Rubberlike Material”, Rubber Chemistry and Technology, 73, 1–18.

[60] Treloar, L. R. G. 1946. “The photoelastic properties of short-chain molecular networks”, Transactions of the Faraday Society, 50, 881–896.

[61] Treloar, L. R. G. 1943. “The elasticity of a network of long chain molecules”, Transactions of the Faraday Society, 39, 36–64, 241–246.

[62] Treloar, L. R. G. 1975. The Physics of Rubber Elasticity (Third Edition). Oxford: Clarendon Press.

[63] Treloar, L. R. G., Riding, G. 1979. “A Non–Gaussian theory of rubber in biaxial strain. I. Mechanical properties”, Proceedings of the Royal Society of London A, 369, 261–280.

[64] Treloar, L. R. G. 1943. “The elasticity of a network of long chain molecules”, Transactions of the Faraday Society, 39, 36–64, 241–246.

[65] Wang, M. C., Guth, E. 1952. “Statistical Theory of Networks of Non-Gaussian Flexible Chains”, The Journal of Chemical Physics, 20, 1144.

[66] Yeoh, O. H. 1990. “Characterization of elastic properties of carbon-black-filled rubber vulcanizates”, Rubber Chemistry and Technology, 63, 792–805.

[67] Persson B.N.J., Albohr O., Heinrich G., Ueba, H. 2005 “Crack propagation in rubber-like materials” Journal of Physics: Condensed Matter 17, 1071-1142

[68] Miehe, C. **Dal, H**., Schanzel, L.M., Raina A. 2016. “A phase-field model for chemo-mechanical induced fracture in lithium-ion battery electrode particles”, 106(9), 683-711 .

[69] Gültekin, O. **Dal, H**. Holzapfel, G.A. 2016. “A phase-field approach to model fracture of arterial walls: Theory and finite element analysis”, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 212, 542-566.

[70] **Dal, H**. Cansiz, B., Miehe, C. 2018. “A three-scale compressible microsphere model for hyperelastic materials”, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 116, 412-433.

Ek 1: FEAP 8.3 için Kullanıcı Tanımlı Eleman ve Malzeme Alt Programları

Ek1a: Eleman alt programı

```
subroutine elmt01(d,ul,xl,ix,tl,s,p,ndf,ndm,nst,isw)
c-----[--.----+----.----+----.-------------------------------------
---]
c     Purpose: 3-D finite deformation element for phase field
c        "      fracture of rubbery polymers
c     Date: 01.06.2017 Computational Micromechanics Research Group
c                      Middle East Technical University
c                      Asst. Prof. Dr. Hüsnü Dal
c-----[--.----+----.----+----.-------------------------------------
---]
      implicit  none

      include  'bdata.h'
      include  'cdata.h'        !numnp,numel,nummat,nen,neq,ipr
      include  'cdat1.h'
      include  'cdamag.h'
      include  'debugs.h'
      include  'elcoor.h'
      include  'eldata.h'       !dm,n,ma,mct,iel,nel
      include  'elengy.h'
      include  'elplot.h'
      include  'eltran.h'
      include  'hdata.h'  !common /hdata/  nh1,nh2,nh3,ht1,ht2,ht3,
nlm,plm,nge
      include  'iofile.h'
      include  'ndata.h'
      include  'part0.h'
      include  'pglob1.h'
      include  'plast3f.h'
      include  'pmod2d.h'
      include  'prld1.h'
      include  'prstrs.h'
      include  'ptdat6.h'
      include  'rdata.h'
      include  'tdata.h'
      include  'comblk.h'
c     include  'homoc.h'       !common /homoc/  tphi, tvol
      include  'counts.h'

      integer   ix(*),ndf,ndm,nst,isw,i,ii,i1,j,jj,j1,k
      integer   l,lint,nhv,nn,nhi,istrt,ord,nhlo,nhln,nhist,nhli
      real*8    bdb,xipa,wena
      real*8    d(*),tl(*),ul(ndf,nen,*),xl(ndm,*),s(nst,*),p(ndf,*)
      real*8    sg(4,125),sv(5,16),xsj(125),xx(3)
      real*8    f(9,2,125),finv(3,3,125),df(3,3,125),detfi(2,125)
!see kinematic
      real*8    shp(4,27,125),shpl(3,27,125)
      real*8    aa(6,6),dd(6,6,125),xu(3,125)
      real*8    sigv(24),sigl(10,125),sigp(10,125)
      real*8    bbd(3,6),r1(3,125),vv(5)
      real*8    dvol(125),dvol0(125),xr(3,125),ur(3,125)
      real*8    gpv, phid(1,125),gphid(1,3,125),phidd(1,125)
      real*8    xh(3,125)
      real*8    xAd,x_l,x_eta,xHH(1,125),x_l2

c...  MATERIAL DATA
```

```
      if(isw.eq.1) then
         write(*,2000)
         call umati1('ARTE',vv,d,d(ndd-nud+1),nh1,nh3)
         nhist = 1              !number of history variables
         nh1   = 8*nh1          !time dependent history element
parameters
         nh2   = nh1
         nh3   = 8*nh3          !time independent history parameters
c...  perform some initializations
         stype = d(16)          !two dimen. type  1) plane stress 2)
plane strain ...
         etype = d(17)          !element form.    1) displ 2)mixed
3)enhanced
         dtype = d(18)          !deformation zype 1)finite 2)small
c...  set plot sequence for 4/10-nod tet or 8/27-node bricks
         if(nen.eq.4) then
            call pltet4(iel)
         elseif(nen.eq.10) then
            call pltet10(iel)
         elseif(nen.eq.27) then
            call plbk27(iel)
         else
            call plbrk8(iel)
         endif
c...  COMPUTE TANGENT STIFFNESS AND RESIDUAL FORCE VECTOR
      else                      !isw.ne.1
c..   get quadrature information
         if(nel.eq.4) then
            ord = 1
            call tint3d(ord,lint,sv)
         elseif(nel.eq.10) then
            ord = 2
            call tint3d(3,lint,sv)
         elseif(nel.eq.8) then
            ord = 0
            d(5)= 2.d0          ! Number Gauss points in each dir.
            l   = nint(d(5))
            call int3d(l,lint,sg)
         endif
c..   compute shape functions
         do l = 1,lint
            if(ord.gt.0) then
               call tetshp(sv(1,l),xl,ndm,nel,xsj(l),shp(1,1,l))
!Ver 8.2
               dvol0(l) = xsj(l)*sv(5,l)
            else
               call shp3d(sg(1,l),xsj(l),shp(1,1,l),xl,ndm,nel)
               dvol0(l) = xsj(l)*sg(4,l)
            endif
         end do                 ! l
c...  compute coordinates
         do l = 1,lint          !loop over GP
            do i = 1,ndm        !loop over coordinates
               xr(i,l) = 0.0d0
               ur(i,l) = 0.0d0
               do j = 1,nel
                  xr(i,l) = xr(i,l) + shp(4,j,l)*xl(i,j)
                  ur(i,l) = ur(i,l) + shp(4,j,l)*ul(i,j,1)
               enddo            ! j
               ur(i,l) = ur(i,l) + xr(i,l)
            enddo               ! i
```

```
         enddo                   ! l
c...  degrees of freedom with enhanced modes/set history type and
size
         nhv   = nint(d(15))     !nh1 history variable counter
         istrt = nint(d(84))     !constitutive start indicator
c...  initialize history variables
         if(isw.eq.14) then      !isw.eq.14
            do l = 1,lint
c...  set time-independent element history data
c     do k = 1,3
c     nhli = (l-1)*7+nh3+k-1
c     hr(nhli) = xf(k)
c     hr(nhli+3)=xs(k)
c     enddo !k
c     endif !nstep
               do i = 1,9
                  f(i,1,l)    = 0.0d0
                  f(i,2,l)    = 0.0d0
                  finv(i,1,l) = 0.0d0
               end do            ! i
               detfi(1,l)  = 1.d0
               detfi(2,l)  = 1.d0
               do i = 1,9,4
                  f(i,1,l)    = 1.0d0
                  f(i,2,l)    = 1.0d0
               end do            ! i
               finv(1,1,l) = 1.0d0
               finv(2,2,l) = 1.0d0
               finv(3,3,l) = 1.0d0
            end do               ! l
         else                    !if isw.ne.14
c...  compute deformation gradient, inverse and determinant.
            do l = 1,lint
           call
kine3d(shp(1,1,l),shpl(1,1,l),ul,f(1,1,l),finv(1,1,l),
     &                        df(1,1,l),detfi(1,l),ndf,nel,nen)
               dvol(l) = dvol0(l)*detfi(1,l)
            enddo                !l
         endif                   !isw.eq.14
c...  compute crack phase-field and its spatial gradient
         do l = 1,lint
            phid(1,l)   = 0.0d0
            phidd(1,l)  = 0.0d0
            do i = 1,nel
               phid(1,l)   = phid(1,l)   + shp(4,i,l)*ul(4,i,2)
               phidd(1,l)  = phidd(1,l)  + shp(4,i,l)*ul(4,i,1)/dt
            enddo                !i
            do j =1,ndm
               gphid(1,j,l) = 0.d0
               do i = 1,nel
                  gphid(1,j,l)= gphid(1,j,l) + shpl(j,i,l)*ul(4,i,1)
               enddo             ! i
            enddo                ! j
         enddo                   ! l
c...  compute Cauchy stresses and spatial tangent tensor at t-n+1
      nhi = 0
      nn  = nhi
c...  get the crack length scale
         x_l  = d(ndd-nud+8)
         x_l2 = x_l*x_l
c...  get artificial viscosity
```

```
         x_eta = d(ndd-nud+11)
c...  ------------------------------------------------------------
         do l = 1,lint
c...  zero stress and moduli
         do i = 1,6
            sigv(i) = 0.0d0
            do j = 1,6
               aa(j,i) = 0.0d0
            enddo                ! j
         enddo                   ! i
         do i = 1,3
            xref(i) = xr(i,l)
            xcur(i) = xr(i,l) + ur(i,l)
         enddo                   ! i
c...  pass crack phase field to gauss point
            gpv  =  phid(1,l)   !crack phase field
            nhlo = (l-1)*1  + nh1
            nhln = (l-1)*1  + nh2
            nhli = (l-1)*0  + nh3
            call umatl1(f(1,1,l),detfi(1,l),gpv,d, d(ndd-nud+1),
     &           hr(nhlo),hr(nhln),hr(nhli),1,1,l, sigv,aa,isw)
c...  get gradient d as xh (1-9,l)
            xh(1,l) = x_l2*gphid(1,1,l)*dvol0(l) !crack in 1- or x-
direction
            xh(2,l) = x_l2*gphid(1,2,l)*dvol0(l) !crack in 2- or y-
direction
            xh(3,l) = x_l2*gphid(1,3,l)*dvol0(l) !crack in 3- or z-
direction
c...  get the crack growth function
            xHH(1,l) =sigv(20)
c...  store time history plot data for element
            k = 6*(l-1)
            do i = 1,6
               tt(i+k)   = sigv(i)
               sigp(i,l) = sigv(i) !*1.d6
               sigl(i,l) = sigv(i)*dvol0(l)
               do j = 1,6
                  dd(j,i,l) = aa(j,i)*dvol0(l)
               enddo            ! j
            enddo               ! i
            nn = nn + nhv
         enddo                   ! l
         if(isw.eq.13) then
c...  do nothing!
         else
c...  ----------------STIFFNESS AND RESIDUAL------------------------
------
            if(isw.eq.3 .or. isw.eq.6) then
               do l = 1,lint
                  do i = 1,nel
c...  compute stress divergence term
                     r1(1,i) = shp(1,i,l)*sigl(1,l)
     &                       + shp(2,i,l)*sigl(4,l)
     &                       + shp(3,i,l)*sigl(6,l)
                     r1(2,i) = shp(1,i,l)*sigl(4,l)
     &                       + shp(2,i,l)*sigl(2,l)
     &                       + shp(3,i,l)*sigl(5,l)
                     r1(3,i) = shp(1,i,l)*sigl(6,l)
     &                       + shp(2,i,l)*sigl(5,l)
     &                       + shp(3,i,l)*sigl(3,l)
```

```
                    p(1,i)  = p(1,i) - r1(1,i) !!Remark: Computed
with (-) sign
                    p(2,i)  = p(2,i) - r1(2,i)
                    p(3,i)  = p(3,i) - r1(3,i)
c...  the residual term from crack phase field
                  p(4,i)  = p(4,i) ! Remark: Computed with (-) sign
     &                  - shpl(1,i,l)*xh(1,l) ! B^t* l^2*(nabla_d)
dV
     &                  - shpl(2,i,l)*xh(2,l)
     &                  - shpl(3,i,l)*xh(3,l)
     &                  - shp(4,i,l)*( phid(1,l) - 2.d0*
     &                  ( 1.d0-phid(1,l) )*xHH(1,l) !N^t (d  - 2(1-
d)H)
     &                  +x_eta*phidd(1,l) )*dvol0(l)
                enddo           ! i
c...  compute element matrix
                  if(isw.eq.3) then
c...  K11 = K^mech-mech
                    i1 = 0
                    do i = 1,nel
c...  PART 1- geometric  part
                       j1 = 0
                       do j = 1,nel
                          bdb = (r1(1,i)*shp(1,j,l)
     &                         + r1(2,i)*shp(2,j,l)
     &                         + r1(3,i)*shp(3,j,l))
                          do jj = 1,ndm
                             s(i1+jj,j1+jj) = s(i1+jj,j1+jj) + bdb
                          enddo ! jj
                          j1 = j1 + ndf
                       enddo   ! j
c...  PART 2- material part
                       do jj = 1,6
                          bbd(1,jj) = shp(1,i,l)*dd(1,jj,l)
     &                              + shp(2,i,l)*dd(4,jj,l)
     &                              + shp(3,i,l)*dd(6,jj,l)
                          bbd(2,jj) = shp(1,i,l)*dd(4,jj,l)
     &                              + shp(2,i,l)*dd(2,jj,l)
     &                              + shp(3,i,l)*dd(5,jj,l)
                          bbd(3,jj) = shp(1,i,l)*dd(6,jj,l)
     &                              + shp(2,i,l)*dd(5,jj,l)
     &                              + shp(3,i,l)*dd(3,jj,l)
                       enddo   ! jj
                       j1 = 0
                       do j  = 1,nel
                          do ii = 1,ndm
                             s(i1+ii,j1+1) = s(i1+ii,j1+1)
     &                            + bbd(ii,1)*shp(1,j,l)
     &                            + bbd(ii,4)*shp(2,j,l)
     &                            + bbd(ii,6)*shp(3,j,l)
                             s(i1+ii,j1+2) = s(i1+ii,j1+2)
     &                            + bbd(ii,4)*shp(1,j,l)
     &                            + bbd(ii,2)*shp(2,j,l)
     &                            + bbd(ii,5)*shp(3,j,l)
                             s(i1+ii,j1+3) = s(i1+ii,j1+3)
     &                            + bbd(ii,6)*shp(1,j,l)
     &                            + bbd(ii,5)*shp(2,j,l)
     &                            + bbd(ii,3)*shp(3,j,l)
                          enddo ! ii
                          j1 = j1 + ndf
                       enddo   ! j
```

```
                        i1 = i1 + ndf
                     enddo      ! i
c...  end mechanical part
c...  begin crack phase field part
c...  K33 =K^dd
                    i1 = 0
                    do i = 1,nel
                       j1 = 0
                       do j = 1,nel
                          xAd =( shpl(1,i,l)*shpl(1,j,l)
     &                         + shpl(2,i,l)*shpl(2,j,l)
     &                         + shpl(3,i,l)*shpl(3,j,l))*x_l2
     &                         *dvol0(l)
                          s(i1+4,j1+4) = s(i1+4,j1+4)+xAd
     &                         + shp(4,i,l)*shp(4,j,l)*dvol0(l)
     &                         * (1.d0+2.d0*xHH(1,l)
     &                         +x_eta/dt  !artificial viscosity
     &                         )

                            j1 = j1 + ndf
                        enddo   ! j
                        i1 = i1 + ndf
                     enddo      ! i
c...  end crack phase field part
                  endif         !isw.eq.3
               enddo            ! l
c...  -------------OUTPUT STRESSES----------------------------
            elseif(isw.eq.4 .or. isw.eq.8 .or. isw.eq.16) then
               xipa = 0.0d0
               wena = 0.0d0
               do i = 1,ndm
                  xx(i) = 0.0d0
               enddo            ! i
               do l = 1,lint
                  do j = 1,ndm
                     do i=1,nel
                        xx(j)   = xx(j) + 0.125*shp(4,i,l)*xl(j,i)
!0.25 tetra
                     enddo      ! i
                  enddo         ! j
c...  move stresses and jacobian for printing
                  xipa = xipa + 0.125d0*xipr   !0.25 tetra
                  wena = wena + 0.125d0*wengy  !0.25 tetra
c...  store arrays for plotting.
                  sigp(10,l) = 0.0d0
                  sigp(9,l)  = 0.0d0
               enddo            ! l
c...  --------------------  OUTPUT STRESSES--------------------
               if (isw .eq. 4) then
                  call pstr3d(sigv,sigv(7))
                  mct = mct - 2
                  if(mct.le.0) then
                     write(iow,2001) o,head
                     if(ior.lt.0) write(*,2001) o,head
                     mct = 50
                  endif
                  write(iow,2002) n,(sigv(ii),ii=1,6),
     &                 ma,(sigv(ii),ii=7,9),xx
                  if(ior.lt.0) then
                     write(*,2002) n,(sigv(ii),ii=1,6),
     &                    ma,(sigv(ii),ii=7,9),xx
```

```
                  endif
c...  -------PROJECT STRESSES ONTO THE NODES FOR PLOTTING--------
               elseif(isw.eq.8) then
!     do l = 1,lint
!     do i = 1,6
!     sigp(i,l) = sigv(i) !*1.0d6
!     enddo !i
!     enddo !l
c...  compute current geometry
                  do i = 1,ndm
                     do j = 1,nel
                        xu(i,j) = xl(i,j) + ul(i,j,1)
                     enddo      ! j
                  enddo         ! i
                  call slcn3d(sigp,shp,dvol0,p,s,lint,nel)
               endif
            endif
         endif
      endif
c..   FORMAT
 2000 format(
     &     /5x,'Three   D i m e n s i o n a l   E l e m e n t ',
     &     /5x,'f o r   P h a s e   F i e l d   F r a c t u r e ',
     &     /5x,'o f  R u b b e r y  P o l y m e r s',/)
 2001 format(a1,20a4//5x,'Element Stresses'//
     &     '   Elem.   11-Stress   22-Stress   33-Stress   12-
Stress',
     &     '   23-Stress   13-Stress'/
     &     '   Matl.    1-Stress    2-Stress    3-Stress',
     &     '   1-Coord     2-Coord     3-Coord ')

 2002 format(i8,1p,6e12.4/i8,1p,6e12.4/1x)
 1060 format(/'     ----------  K_ele   ------- ' /
     *     8(f15.8,2x)/         !1
     *     8(f15.8,2x)/         !2
     *     8(f15.8,2x)/         !3
     *     8(f15.8,2x)/         !4
     *     8(f15.8,2x)/         !5
     *     8(f15.8,2x)/         !6
     *     8(f15.8,2x)/         !7
     *     8(f15.8,2x))         !8

      end
```

Ek 1b: Malzeme alt programı

```
c$Id: umati1.f,v 1.1 2004/01/11 19:11:33 rlt Exp $
      subroutine umati1(type,vv, d, ud, n1,n3)

c      * * F E A P * * A Finite Element Analysis Program

c....  Copyright (c) 1984-2004: Regents of the University of
California
c                                All rights reserved

c-----[--.----+----.----+----.-------------------------------------
---]
c      Purpose: Dummy user material model routine
c
c      Inputs:
```

```
c         type   - Name of material model
c         vv(5)  - Command line real data
c         d(*)   - Program material parameter data
c
c      Outputs:
c         ud(*)  - Material parameter data for model
c         n1     - Number of history items/point (time   dependent)
c         n3     - Number of history items/point (time independent)
c-----[--.----+----.----+----.-------------------------------------
---]
      implicit  none

      include 'iofile.h'
      logical   pcomp, pinput, errck
      character type*15
      integer   n1,n3, ii
      real*8    vv(5),d(*),ud(*)
c     set command name
      if(pcomp(type,'mat1',4)) then ! Default form: DO NOT CHANGE
         type = 'MSPH'              ! Specify new 'name'
c     Input user data and save in ud(*) array
      else                          ! Perform input for user data
         n1 = 1                 !time dependent history parameters
         n3 = 0                 !time-independent micro-structural
parameters
         errck = pinput(ud(1),3)
         errck = pinput(ud(7),3)
c.... output of material data informations
      write(*    ,2000) 1,9,1
      write(iow  ,2000) 1,9,1
      write(iow  ,2001) (ud(ii),ii=1,3)
      write(  *  ,2001) (ud(ii),ii=1,3)
      write(iow  ,2002) (ud(ii),ii=4,6)
      write(  *  ,2002) (ud(ii),ii=4,6)
      write(iow  ,2003) (ud(ii),ii=7,9)
      write(  *  ,2003) (ud(ii),ii=7,9)
      endif
 2000 format(
     * 10x,'MATERIAL MODEL FOR FEAP ----- (c) H. Dal, ......METU'/
     * 10x,'[  ] [     ] Finite Elasticity Model ...............'/
     * 10x,'[  ] [ima  ] Micro-Sphere  03/08/2017
..............',i12/
     * 10x,'[G4] [ndmat] material parameters
...................',i12/
     * 10x,'[G5] [nhmat] material history variables
............',i12)
 2001 format(
     * 10x,'[ 1] [xkapa] bulk modulus (penalty parameter)
......',e12.5/
     * 10x,'[ 2] [  xmu] reference shear modulus
...............',e12.5/
     * 10x,'[ 3] [   xN] Number of chain segments
..............',e12.5)
 2002 format(
     * 10x,'[ 4] [   xpp] Non-affine stretch parameter
.........',e12.5/
     * 10x,'[ 5] [    xU] Tube geometry parameter
..............',e12.5/
     * 10x,'[ 6] [    xq] Non-affine tube parameter
............',e12.5)
 2003 format(
```

```
     * 10x,'[ 7] [  g_c]  crtical surface
energy...............',e12.5/
     * 10x,'[ 8] [  x_l]  crack length scale
parameter..........',e12.5/
     * 10x,'[ 9] [x_eta]  artificial
viscosity..................',e12.5)
      return
      end
c
c*****************************************************************
******
c
      subroutine
umatl1(f,detf,gpv,d,ud,hn,h1,h0,nh,ii,istrt,s,dd,isw)
!      subroutine modl04(d,xg,h1,h2,f,fe,g0,g, s,aa)
     implicit none
c     History variables
      real*8 xg(3,2), g0(6), g(6)
      real*8 d(*)
      real*8 f(3,3), detf, invf(3,3),fe(3,3), fact
      real*8  gpv
      real*8  ud(*),h0(*),hn(nh),h1(nh),s(24),dd(6,6)
c...  Stresses and Moduli
      real*8 tauve(6),tauie(6)
      real*8 tngve(6,6), tngie(6,6)
c...  Material Parameters
      real*8 xkapa, xmu, xN
      real*8 xpp, xU, xq
      real*8  xp, lambda,lambda_r
      real*8 fbar(3,3), invfbar(3,3),detfbar
      real*8 tau_iso(3,3)
      real*8 aa(6,6)
      real*8 trace, delta
      real*8 xr(3,21), xt(21,3)
      real*8 xw(21), xl(21)
      real*8 one(6),xip(6,6), xh(3,3), xhh(3,3,3,3)
      real*8 f1, taufb(3,3), cf, cbarf(3,3,3,3)
      real*8 xk(3,3), vbar(21), xkk(3,3,3,3), xgg(3,3,3,3)
      real*8 taucb(3,3), cbarc(3,3,3,3), taub(3,3), cbar(3,3,3,3)
      real*8 xnn(21,3),teta,xct(9)
      integer nh,n, ima, isw,ii,istrt
      integer ij(3,3), i, j, k, l , z, m, ia, ic,iia,iib,iic,iid
c...  crack phase field
      real*8  g_c,x_l
      real*8 psicr,psi,psi0, lambda_r0, inv_lang_0, inv_lang
      real*8 xdam,phid,yHH
c...  define Voigt maps
      data ij/ 1 , 4 , 6 ,
     *         4 , 2 , 5 ,
     *         6 , 5 , 3 /

      include 'iofile.h'

!-------------------------------------------------------------------
!                   ----- MATERIAL PARAMETERS -----
!-------------------------------------------------------------------
!                  Volumetric Part
     xkapa = ud(1) ! Kappa
!                  Isochoric Part
     xmu  = ud(2) ! Shear Moduli mu = n k_b \theta
     xN   = ud(3) ! Segment number
```

```
      xpp  = ud(4)
      xU   = ud(5)
      xq   = ud(6)
c...  coupled part
      g_c   = ud(7)
      x_l   = ud(8)
       phid = gpv              !crack phase field
c...  compute degradation functions
       xdam  =  (1.d0-phid)**2.d0 + 1.d-8 ! a tolerance is added for
numerical stabilization (Hüsnü Dal)
!-------------------------------------------------------------------
!              ----- TAYLOR EXPANSION PARAMETERS -----
!-------------------------------------------------------------------
       xct(1) = 3.d0
       xct(2) = 1.8d0
       xct(3) = 1.69714285714286d0
       xct(4) = 1.75885714285714d0
       xct(5) = 1.871866419294991d0
       xct(6) = 1.871866419294991
       xct(7) = 2.112823651776794
       xct(8) = 2.202302871501608
       xct(9) = 2.25295787066405d0
!       xct(10) = 2.255767492796794d0
!       xct(11) = 2.206400668426122d0
!       xct(12) = 2.106427838768640d0

c...  Inititialize stresses and moduli
       call pzero(s,24)
       call pzero(aa,6*6)
!-------------------------------------------------------------------!
!                          --- PART I ---
!    ---- Volumetric Part of the Stress & Tangent Moduli ----
!                 Kirchhoff Stress and Moduli
!-------------------------------------------------------------------!
!     call det_feap(f, detf)
      xp = xkapa *(detf-1.d0)         !pressure
!      tauve  :Volumetric part of the Kirchhoff-Stresses
      do i = 1, 3
            tauve(i)   = xp
            tauve(i+3) = 0.d0
      enddo
!      compute volumetric tangent
      call pzero(tngve, 6*6)
!      C_vol = (s+p) 1 dyad 1 - 2p II
!      C_vol = (s+p) 1 dyad 1
      do i = 1, 3
        do j = 1, 3
          tngve(i,j) = xp + xkapa
        enddo
      enddo
!      C_vol = C_vol -2p II    where II : Fourth order identity
tensor
      do i = 1, 3
        tngve(i,i) = tngve(i,i) - 2.d0*xp
      enddo
      do i = 4, 6
        tngve(i,i) = tngve(i,i) - xp
      enddo
!-------------------------------------------------------------------
!
!                            --- PART II ---
```

```
!      ---- Isochoric Part of the Stress & Tangent Moduli ----
!-----------------------------------------------------------------------
!
c...
      data xr /
     *    0.d0                , 0.d0               , 1.d0
,
     *    0.d0                , 1.d0             , 0.d0               ,
     *    1.d0                , 0.d0               , 0.d0
,
     *     0.d0                  , 0.707106781187d0  ,
0.707106781187d0  ,
     *     0.d0                  ,-0.707106781187d0  ,
0.707106781187d0  ,
     *     0.707106781187d0      , 0.d0               ,
0.707106781187d0  ,
     * -0.707106781187d0     , 0.d0             , 0.707106781187d0  ,
     *     0.707106781187d0      , 0.707106781187d0  , 0.d0
,
     * -0.707106781187d0     , 0.707106781187d0  , 0.d0
,
     *     0.836095596749d0      , 0.387907304067d0  ,
0.387907304067d0  ,
     * -0.836095596749d0     , 0.387907304067d0  , 0.387907304067d0
,
     *     0.836095596749d0      ,-0.387907304067d0  ,
0.387907304067d0  ,
     * -0.836095596749d0     ,-0.387907304067d0  , 0.387907304067d0
,
     *     0.387907304067d0      , 0.836095596749d0  ,
0.387907304067d0  ,
     * -0.387907304067d0     , 0.836095596749d0  , 0.387907304067d0
,
     *     0.387907304067d0      ,-0.836095596749d0  ,
0.387907304067d0  ,
     * -0.387907304067d0     ,-0.836095596749d0  , 0.387907304067d0
,
     *     0.387907304067d0      , 0.387907304067d0  ,
0.836095596749d0  ,
     * -0.387907304067d0     , 0.387907304067d0  , 0.836095596749d0
,
     *     0.387907304067d0      ,-0.387907304067d0  ,
0.836095596749d0  ,
     * -0.387907304067d0     ,-0.387907304067d0  , 0.836095596749d0
/

      data xw /
     *     0.0265214244093d0 , 0.0265214244093d0 , 0.0265214244093d0
,
     *     0.0199301476312d0 , 0.0199301476312d0 , 0.0199301476312d0
,
     *     0.0199301476312d0 , 0.0199301476312d0 , 0.0199301476312d0
,
     *     0.0250712367487d0 , 0.0250712367487d0 , 0.0250712367487d0
,
     *     0.0250712367487d0 , 0.0250712367487d0 , 0.0250712367487d0
,
     *     0.0250712367487d0 , 0.0250712367487d0 , 0.0250712367487d0
,
     *     0.0250712367487d0 , 0.0250712367487d0 , 0.0250712367487d0
/
```

```
      data one / 1.d0 , 1.d0 , 1.d0 , 0.d0 , 0.d0 , 0.d0 /

c...  deviatoric projection tensor
      data xip /
     * 0.66666666666666667d0,
     *-0.33333333333333333d0,
     *-0.33333333333333333d0,
     * 0.0d0 , 0.0d0 , 0.0d0,
     *-0.33333333333333333d0,
     * 0.66666666666666667d0,
     *-0.33333333333333333d0,
     * 0.0d0 , 0.0d0 , 0.0d0,
     *-0.33333333333333333d0,
     *-0.33333333333333333d0,
     * 0.66666666666666667d0,
     * 0.0d0 , 0.0d0 , 0.0d0,
     * 0.0d0 , 0.0d0 , 0.0d0,
     * 0.5d0 , 0.0d0 , 0.0d0,
     * 0.0d0 , 0.0d0 , 0.0d0,
     * 0.0d0 , 0.5d0 , 0.0d0,
     * 0.0d0 , 0.0d0 , 0.0d0,
     * 0.0d0 , 0.0d0 , 0.5d0 /

!     fact = J^(-1/3)
      fact = detf**(-1.d0/3.d0)
!     Fbar = J^(-1/3)*F
      do i = 1, 3
           do j = 1, 3
                 fbar(i,j) = fact*f(i,j)
           enddo
      enddo
!-----------------------------------------------------------------------
-
c...                ---   Non-affine stretch part ---
!-----------------------------------------------------------------------
-

!     Deformed tangents t = Fbar*r
      call pzero(xt, 21*3)
      do i = 1, 21
        do j = 1, 3
          do k = 1, 3
            xt(i,j) = xt(i,j) + fbar(j,k)*xr(k,i)
          enddo
        enddo
      enddo
!       lambdabar = (g*t * t)^(1/2)
      do i = 1, 21
          xl(i) = dsqrt(xt(i,1)**2.d0 + xt(i,2)**2.d0 +
xt(i,3)**2.d0)
      enddo
!     Lambda
      lambda = 0.d0
      do i = 1, 21
         lambda = lambda + xl(i)**xpp * xw(i)*2.d0
      enddo
      lambda = lambda**(1/xpp)
c...    Compute lambda_r
        lambda_r = lambda/dsqrt(xN)
!     h
```

```
      call pzero(xh, 3*3)
      do i = 1, 3
        do j = 1, 3
          do k = 1, 21
            xh(i,j) = xh(i,j) + xl(k)**(xpp-2.d0)
     *          * xt(k,i)*xt(k,j)*xw(k)*2.d0
                enddo
           enddo
      enddo
!     H
      call pzero(xHH, 3*3*3*3)
      do i = 1, 3
        do j = 1, 3
          do k = 1, 3
            do l = 1, 3
           do m = 1, 21
      xHH(i,j,k,l) = xHH(i,j,k,l) + (xpp-1.d0)*xl(m)**(xpp-2.d0)*
     *  xt(m,i)*xt(m,j)*xt(m,k)*xt(m,l)*xw(m)*2.d0
              enddo
            enddo
          enddo
        enddo
      enddo
!     taufb
!        Inverse Langevin Function
!     f1 = xmu*lambda*(3.d0*xN-lambda**2.d0)/(xN-lambda**2.d0)
!        Taylor Series Expansion
         f1 = 0.d0
         do i =1,7
          f1 = f1 + xct(i)*lambda_r**(2.d0*dble(i) - 1.d0)
         enddo
         f1 = xmu*dsqrt(xN)*f1
!     cf
!        Inverse Langevin Function
!     cf = xmu*(lambda**4.d0+3.d0*xN**2.d0)/(xN-lambda**2.d0)**2.d0
c... Taylor Series Expansion
         cf = 0.d0
         do i = 1,7
          cf = cf + xct(i)*(dble(i)-1.d0)*
     *              lambda_r**((dble(i) - 1.d0))
         enddo
         cf = xmu*cf
!     taufb
      do i = 1, 3
        do j = 1, 3
        taufb(i,j) = f1*lambda**(1.d0-xpp)*xh(i,j)
        enddo
      enddo
!     cbarf
      do i = 1, 3
        do j = 1, 3
          do k = 1, 3
            do l = 1, 3
      cbarf(i,j,k,l) = ( cf*lambda**(1.d0-1.d0*xpp)-(xpp-1.d0)
     *                 * f1*lambda**(1.d0-2.d0*xpp)
)*xh(i,j)*xh(k,l)
     *                 + f1*lambda**(1-xpp)*xhh(i,j,k,l)
            enddo
          enddo
        enddo
      enddo
```

```
!-----------------------------------------------------------------
-
c...                ---   Non-affine tube part ---
!-----------------------------------------------------------------
-
      call inv_jac(fbar, invfbar, detfbar)
!     deformed normals t = Fbar -T *r
      call pzero(xnn, 21*3)
      do i = 1, 21
        do j = 1, 3
          do k = 1, 3
            xnn(i,j) = xnn(i,j) + invfbar(j,k)*xr(i,k)
          enddo
        enddo
      enddo
!     vbar = (g*n * n)^(1/2)
      do i =  1, 21
      vbar(i) = dsqrt(xnn(i,1)**2.d0 + xnn(i,2)**2.d0 +
xnn(i,3)**2.d0)
      enddo
!     k
      call pzero(xk, 3*3)
      do i = 1, 3
           do j = 1, 3
          do k = 1, 21
      xk(i,j) = xk(i,j)+xq*vbar(k)**(xq-2.d0)*xnn(k,i)*xnn(k,j)
     *                                                *xw(k)*2.d0
          enddo
        enddo
      enddo
c     write(*,*) 'hello'
!     K
      call pzero(xkk, 3*3*3*3)
      do i = 1, 3
        do j = 1, 3
          do k = 1, 3
            do l = 1, 3
           do m = 1, 21
       xkk(i,j,k,l) = xkk(i,j,k,l) + xq*(xq-2.d0)*vbar(m)**(xq-4.d0)*
     *xnn(m,i)*xnn(m,j)*xnn(m,k)*xnn(m,l)*xw(m)*2
              enddo
            enddo
          enddo
        enddo
      enddo
!     G
      call pzero(xgg, 3*3*3*3)
      do i = 1, 3
        do j = 1, 3
          do k = 1, 3
            do l = 1, 3
           do m = 1, 21
       xgg(i,j,k,l) = xgg(i,j,k,l) + 2.d0*xq*vbar(m)**(xq-2.d0)
     *              * xw(m)*2.d0*
     *   ( delta(i,k)*xnn(m,j)*xnn(m,l)+delta(j,k)*xnn(m,i)*xnn(m,l)
     * +delta(j,l)*xnn(m,i)*xnn(m,k)+delta(i,l)*xnn(m,j)*xnn(m,k)
)/2.d0
              enddo
            enddo
          enddo
        enddo
```

```
      enddo
!     taucb
      do i = 1, 3
        do j = 1, 3
          taucb(i,j) = -xmu*xN*xU*xk(i,j)
        enddo
      enddo
!     cbarc
      do i = 1, 3
        do j = 1, 3
          do k = 1, 3
            do l = 1, 3
      cbarc(i,j,k,l) = xmu*xN*xU*(xkk(i,j,k,l)+xgg(i,j,k,l))
            enddo
          enddo
        enddo
      enddo
!-----------------------------------------------------------------
-
c...              ---   Superimposed stress response ---
!-----------------------------------------------------------------
-
!     Taub
      do i = 1, 3
           do j = 1, 3
           taub(i,j) = taufb(i,j) + taucb(i,j)
           enddo
      enddo
!     Cbar
      do i = 1, 3
           do j = 1, 3
                do k = 1, 3
                     do l = 1, 3
      cbar(i,j,k,l) = cbarf(i,j,k,l) + cbarc(i,j,k,l)
                     enddo
                enddo
           enddo
      enddo
!     Tau_iso = P : Taub = Taub - 1/3* tr(Taub)*delta
      call pzero(tau_iso, 3*3)
       trace = taub(1,1)+taub(2,2)+taub(3,3)
      do i = 1, 3
           do j = 1, 3
                tau_iso(i,j) = taub(i,j) - trace / 3.d0 * delta(i,j)
           enddo
      enddo
!     Transformation of Tau_iso from 3x3 to 6
      do i = 1, 3
          do j = 1, i
          tauie(ij(i,j)) = tau_iso(i,j)
        enddo
      enddo
!     tngie: isochoric elastic moduli
c.............................
       call pzero(tngie, 6*6)
       do i = 1, 6
         do j = 1, 6
      tngie(i,j) = 2.d0/3.d0*
     * ( trace*xip(i,j) - tauie(i)*one(j) - one(i)*tauie(j) )
          enddo
       enddo
```

```
      do i = 1, 3
     do j = 1, i
          do k = 1, 3
         do l = 1, k
           do iia = 1, 3
             do iib = 1, 3
               do iic = 1, 3
                 do iid = 1, 3
       tngie(ij(i,j),ij(k,l)) =tngie(ij(i,j),ij(k,l))+
     * xip(ij(i,j),ij(iia,iib))*cbar(iia,iib,iic,iid)*
     * xip(ij(iic,iid),ij(k,l))
                   enddo
                 enddo
               enddo
             enddo
           enddo
         enddo
       enddo
     enddo
c.............................
!     Kirchhoff stresseses: tau = (tau_vol+tau_iso)
      do i = 1,6
         s(i) =  xdam*(tauve(i) + tauie(i))
      enddo
      trace =(taucb(1,1)+taucb(2,2)+taucb(3,3))/3.d0
      s(10) =taucb(3,3) -trace
!     Obtain Moduli
     do i = 1, 6
        do j = 1, 6
           dd(i,j) = xdam*(tngve(i,j) + tngie(i,j))/detf
        enddo
     enddo
c...  store deformation gradient in the stress field
      s(7) = detf
      s(8) =f(1,1)
      s(9) =f(2,2)
      teta= datan(xg(2,1)/xg(1,1))
      s(10) =s(1)*dcos(teta)**2.d0+s(2)*dsin(teta)**2.d0
     *      +2.d0*s(4)*dsin(teta)*dcos(teta)
!    s(10)=f(3,3)
     s(11)=f(1,2)
     s(12)=f(2,3)
     s(13)=f(1,3)
!    s(8) = f(3,3)
!    s(9) = f(3,3)
!    s(10)= detf!taub(3,3)  f10
!    s(11)= xp
c      write(iow, *) 'detF : ' , detf
c    write(iow, *) '       ------ F ------'
c      write(iow,1020) (f(1,i), i=1,3),
c     * (f(2,i), i=1,3),
c     * (f(3,i), i=1,3)
c... define crack growth functions
        lambda_r0 = 1.d0/dsqrt(xN)
        inv_lang   = 0.d0
        inv_lang_0 = 0.d0
        do i = 1,7
         inv_lang   = inv_lang + xct(i)*lambda_r**(2.d0*dble(i)-
1.d0)
         inv_lang_0 = inv_lang_0 +xct(i)*lambda_r0**(2.d0*dble(i)-
1.d0)
```

```
         enddo
         psi0 = xmu*xN*(lambda_r0*inv_lang_0 +
     *                 dlog(inv_lang_0/dsinh(inv_lang_0)))
         psi  = xmu*xN*(lambda_r*inv_lang
     *                  + dlog(inv_lang/dsinh(inv_lang))) - psi0
      psicr  = 1.d0
      yHH    = (xkapa*(detf-dlog(detf)-1.d0) + psi)/(g_c/x_l)
     *          - psicr
c... update history field
      if (yHH.gt.hn(1).and.yHH.gt.0.d0) then
        h1(1) = yHH
      else
        h1(1) = hn(1)
      endif
c... pass the crack growth functions
      s(20) = h1(1)
 1020 format(
     * f12.5,1x, f12.5,1x, f12.5,1x/
     * f12.5,1x, f12.5,1x, f12.5,1x/
     * f12.5,1x, f12.5,1x, f12.5,1x)
 1060 format(/'     ----------   taucb   ------- ' /
     *f15.8,2x,f15.8,2x,f15.8,2x/
     *f15.8,2x,f15.8,2x,f15.8,2x/
     *f15.8,2x,f15.8,2x,f15.8,2x)
     return
     end
```

TÜBİTAK
PROJE ÖZET BİLGİ FORMU

Proje Yürütücüsü:	Dr. Öğr. Üyesi HÜSNÜ DAL
Proje No:	315M140
Proje Başlığı:	Kauçuk Türü Malzemeler Için Inelastik Yırtılma Ve Kavitasyon Modeli Geliştirilmesi
Proje Türü:	3501 - Kariyer
Proje Süresi:	30
Araştırmacılar:	
Danışmanlar:	
Projenin Yürütüldüğü Kuruluş ve Adresi:	ORTA DOĞU TEKNİK Ü. MÜHENDİSLİK F. MAKİNE MÜHENDİSLİĞİ B.
Projenin Başlangıç ve Bitiş Tarihleri:	01/06/2016 - 01/12/2018
Onaylanan Bütçe:	331738.0
Harcanan Bütçe:	160045.31

TÜBİTAK

Öz:	Kauçuk türü malzemeler esnek mekanik davranışları ve üstün enerji sönümleme özellikleri nedeniyle otomotiv, havacılık ve inşaat sektöründe yaygın kullanıma sahiptir. Kauçuğun inelastik davranışı ve kompleks deformasyonlar altındaki dayanım ve yırtılma özelliklerinin kuramsal ve sayısal olarak modellenmesi, bu malzemenin tasarım aşamasında kritik bir öneme sahiptir. Bu bağlamda mevcut kuramlar henüz kalitatif ve kantitatif kesinlikte sonuç vermemektedir Bu durum kauçuk türü malzemelerin dayanım ve yırtılma özelliklerini kuramsal açıdan ele alan çalışmaları cazip kılmaktadır. Bu projenin amacı, kauçuk türü malzemelerin farklı hızlarda ve değişken yükleme koşulları altında kırılma kriterlerinin kuramsal olarak modellenmesini ve geliştirilen kuramlar için sonlu elemanlar yöntemi (SEY) ile uyumlu sayısal algoritmaların geliştirilmesini içermektedir. Bu kapsamda, kauçuğun kopması, gradyan hasar mekaniği kuramı sayılabilecek olan yaygın alan çatlama teorisiyle modellenecektir. Bu kuram malzememin intak durumdan kırılma durumuna geçişini faz dönüşümü olarak ele almaktadır. Yaygın alan çatlama teorisini kauçuk için uyarlanması için deneylerle tespit edilmiş yırtılma zarfları ile uyumlu kırılma/kopma kriteri geliştirilecek ve yaygın alan çatlama teorisinin içine bünye denklemi şeklinde yerleştirilecektir. İlk aşamada malzemenin yarı-durağan yüklemeler altındaki yırtılması modellenecek ve iki ve üç boyutlu örnek problemlerle doğrulanacaktır. İkinci aşamada bu teori viskoelastik özellikler de dikkate alınarak geliştirilecektir. Geliştirilen modeller basit çekme, iki eksenli gerilim ve hidrostatik çekme gerilmeleri altındaki farklı kopma karakteristikleri altında doğrulanacaktır. Bugüne kadar, fiziksel, mikromekanik ilkelerine dayalı, üç boyutlu, inelastik deformasyon koşullarında çatlama başlangıcını ve ilerleyişini modelleyen yaygın alan çatlama teorisine dayalı bir kuram geliştirilmemiştir. Üçüncü aşamada, kauçuk türü malzemelerin hidrostatik yükler altında gösterdiği kavitasyon türü kararsızlıklar ele alınacaktır. Çok ölçekli, temsili küresel boşluk içeren küresel bir temsili hacim elemanı öncelikle sayısal homojenizasyon yöntemleri ile modellenecek ve porozite etkisini içeren sıkıştırılabilir kauçuk bünye denklemi elde edilecektir. Daha sonra, bu model sürekli ortamlar mekaniği ve hasar mekaniği ilkelerine bağlı kalınarak geliştirilecek ve kavitasyon başlangıcı ve büyümesi modellenecektir. Geliştirilen kuramlar için, sonlu elemanlar yöntemi (SEY) kullanılarak sayısal algoritmalar geliştirilecek ve gerçekleştirilecek benzetimler yardımıyla doğrulama çalışmaları yapılacaktır. Bu kapsamda geliştirilecek sayısal algoritmalar, problem-spesifik çoklu-fizik çözücü açık kaynak kodlu sonlu elemanlar programlarına entegre edilecektir. Proje kapsamında geliştirilen kuramsal ve sayısal yöntem, kauçuk türü malzemelerin tasarımında, özellikle ömür tayini çalışmalarında önemli katkılar sunmaktadır. Deneylerle desteklenen ve idealize edilmiş geometriler için elde edilen analitik yöntemlerle yapılan mühendislik tasarımı günümüzde yerini daha kesin sonuçlar veren bilgisayar destekli, hesaplamalı mekanik ilkelerine dayalı tasarıma bırakmaktadır. Bilgisayar destekli tasarım ürün tasarım aşamasından üretim aşamasına geçiş sürecini ciddi anlamda kısaltmakta ve ürünün kullanım koşulları altında en iyileştirilmesini sağlamaktadır. SEY sayısal bir yöntem olarak ortaya çıktığı son yarım yüzyılda milyarlarca dolarlık bir yazılım sektörüne dönüşmüştür. SEY ile uyumlu kuramların ve bu kuramlardan cebirsel denklemlerinin sayısal çözümlerine yönelik algoritmalarının geliştirilmesi gerek akademik anlamda gerekse mühendislik uygulamaları açısından üzerinde yoğun çalışılan bir alandır. AR-GE endüstrisi, ürün geliştirme sürecinde kullanılan farklı malzemelerin dayanım özelliklerini yüksek kesinlikte öngörebilen yaklaşımlar talep etmektedir. Bu bağlamda proje kapsamında elde edilecek çıktıların önemli bir açığı kapatması hedeflenmektedir.
Anahtar Kelimeler:	hasar mekaniği, polimer mekaniği, sonlu elemanlar yöntemi, polimer mekaniği, kavitasyon
Fikri Ürün Bildirim Formu Sunuldu Mu?:	Hayır

TÜBİTAK